

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: ORGANICKÁ TECHNOLOGIE

Ústav organické technologie, 26.11.2004

Komise (ústav 111):

Doc. Ing. B. Dvořák, CSc. - předseda:

Ing. P. Čapek, CSc. - organizační tajemník

Doc. Ing. Z. Bělohav, CSc.

Doc. Ing. V. Tukač, CSc.

Doc. Dr. Ing. P. Klusoň

Ing. L. Kurc, CSc.

Ing. P. Zámotný, PhD

Přihlášeno: 10 účastníků

Kalčíková Jana	<i>Fuzzy modelování procesu mokré granulace léčiv</i>
Katreniaková Soňa	<i>Analýza produktů a mechanismu pyrolýzy alkanů</i>
Hrádel Martin	<i>Vliv dvojné vazby na pyrolýzu cyklických uhlovodíků</i>
Vitvarová Dana	<i>Hydrogenace a hydrogenolýza isobutyrofenonu – druhý reakční krok syntézy ibuprofenu</i>
Uhlíř David	<i>Kontinuální Fentonova oxidace ve zkrápěném reaktoru</i>
Zárubová Šárka	<i>Imobilizace Ru-BINAP chirálních komplexů na oxidických nosičích</i>
Starkbaumová Lucie	<i>Experimentální a termodynamické hodnocení stability alkylcyklohexanů při pyrolýze</i>
Poliščuk Andrej	<i>Katalyzátor pro hydrogenolýzu methylesterů mastných kyselin</i>
Chytil Lukáš	<i>HPLC/MS tělních tekutin – nový rozměr v medicíně diagnostice</i>
Karhánek David	<i>Studium povrchových komplexů v heterogenní katalýze</i>

Fuzzy modelování procesu mokré granulace léčiv

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

Práce se zabývá fuzzy modelováním procesu mokré granulace, který je klíčovou fází výroby pevných lékových forem s vysokým obsahem účinné látky. Pro návrh a optimalizaci modelů byla použita experimentální data, naměřená na provozních granulátorech akciové společnosti Zentiva - Léčiva v Praze. V souladu s požadavky provozní praxe byly navrženy dva fuzzy modely, sestavené v prostředí programového systému Matlab Fuzzy Logic Toolbox. Výstupy modelů tvoří množství přidané vody potřebné k optimálnímu zvlhčení granulované směsi a příkon motoru hlavního míchadla granulátoru v okamžiku dosažení optimálního složení granulátu. Vstupní veličiny charakterizují tvar a distribuci velikosti částic účinné látky. Praktickými výstupy modelů jsou nomogramy, podle kterých lze optimalizovat množství přidávané vody a predikovat příkon motoru hlavního míchadla při dosažení požadovaného stupně zgranulování směsi.

Analýza produktů a mechanismu pyrolýzy alkanů

Autor: Soňa Katreniaková
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Lineární nasycené uhlovodíky tvoří nejdůležitější součást benzinových, středněvroucích i výševroucích surovin pro ethylenovou pyrolýzu. K analýze chování alkanů z hlediska distribuce produktů pyrolýzy byl použit laboratorní reaktor jako součást pyrolýzní plynové chromatografie. Celkem bylo laboratorně testováno 17 uhlovodíků od ethanu až po dokosan (C_{22}). Výtěžky nejdůležitějších produktů pyrolýzy jednotlivých uhlovodíků byly korelovány se základními charakteristikami, používanými v praxi k hodnocení surovin pro pyrolýzu, např. normálním bodem varu nebo poměrem atomů vodíku a uhlíku v molekule uhlovodíků. Hodnoty výtěžků produktů pyrolýzy a zjištěné trendy v testované řadě alkanů byly analyzovány z hlediska současných představ o mechanismu nejdůležitějších radikálových reakcí při pyrolýze uhlovodíků.

Vliv dvojné vazby na pyrolýzu cyklických uhlovodíků

Autor: Martin Hrádel
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Daniela Vojtová

K hodnocení vlivu dvojné vazby na pyrolýzu cykloalkenů byla využita pyrolýzní plynová chromatografie. Laboratorní experimenty probíhaly při standardní teplotě 810 °C a také při nižších teplotách, zaručujících velmi nízké konverze testovaných uhlovodíků. Výsledky experimentů s nízkou konverzí pyrolyzovaných uhlovodíků umožnily hodnotit selektivitu primárních produktů pyrolýzy (první generace produktů). Výtěžky produktů pyrolýzy cykloalkenů byly porovnány s výtěžky pyrolýzy odpovídajících cykloalkanů. Z výsledků testů vyplynulo, že vlivem elektronových efektů dvojné vazby jsou cykloalkeny podstatně reaktivnější než cykloalkany a že vliv dvojné vazby se projevuje i na rozdílné distribuci výtěžků pyrolýzních produktů. Výsledky laboratorních testů byly konfrontovány s publikovanými daty a představami o produktech a mechanismu pyrolýzy cykloalkenů.

Hydrogenace a hydrogenolýza isobutyrofenonu – druhý reakční krok syntézy ibuprofenu

Autor: Dana Vitvarová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Martina Bejblova

Redukce karbonylových sloučenin na odpovídající uhlovodíky v hydrogenačním prostředí bývá často označována jako hydrodeoxygenace. Přeměna karbonylové skupiny na methylenovou může probíhat třemi mechanismy – hydrogenačně dehydratačním, hydrogenačně hydrogenolytickým, nebo může docházet k přímé hydrogenolýze vazby C=O. Studovaná hydrodeoxygenace isobutyrofenonu na isobutylbenzen je důležitým reakčním krokem při výrobě léčiva ibuprofen.

Hydrodeoxygenace isobutyrofenonu byla studována na Pd nosičových katalyzátorech. Jako nosiče byly použity vybrané zeolity a alumina. Cílem práce bylo sledovat vliv rozpouštědla, nosiče a jeho kyselosti na průběh studované reakce. Další snahou práce bylo spojit první dva syntézní kroky výroby ibuprofenu - acylaci a hydrogenaci do tzv. "one-pot reaction". Modelovou látkou pro tyto reakce byl zvolen toluen.

Katalyzátory Pd nanesené na zeolitových nosičích se ukázaly jako velmi aktivní pro hydrodeoxygenace isobutyrofenonu. Při těchto přeměnách byl vyloučen hydrogenačně-hydrogenolytický mechanismus, neboť příslušný olefin nebyl zaznamenán v reakční směsi. Spojení acylace a hydrogenace zatím neprobíhá podle předpokladů. Přednostně dochází k hydrogenaci aromatického jádra toluenu. Uspokojivějších výsledků bylo dosaženo provedením acylace s následnou hydrogenací.

Kontinuální Fentonova oxidace ve zkrápěném reaktoru

Autor: David Uhlíř
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.

S vývojem čistých technologií a stoupajícími nároky na čistotu procesních a odpadních vod je nezbytné hledat nové technologické postupy odstraňování organických nečistot z vod. Tato práce je věnována testování kontinuální Fentonovy oxidace tzv. mokré oxidace ve zkrápěném reaktoru za teploty a tlaku okolí. Pro oxidaci 0,5% roztoku fenolu peroxidem vodíku byly ověřeny katalytické účinky extrudovaného aktivního uhlí a nasorbovaných iontů železa. Účinek oxidace byl též sledován v závislosti na hydrodynamických vlastnostech reaktoru, tlakové ztrátě a míře smočení katalyzátorem.

Imobilizace Ru-BINAP chirálních komplexů na oxidických nosičích

Autor: Šárka Zárubová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Lukáš Bartek

V posledních letech se v oblasti syntézy léčiv klade velký důraz na přípravu opticky čistých látek s definovanou absolutní konfigurací, především z důvodů rozdílných farmakologických účinků stereoizomerů. V předkládané práci byla věnována pozornost imobilizaci chirálního komplexu Ru-BINAP a jeho použití v hydrogenaci methyl-acetoacetátu (MAA) ve smyslu tvorby (R)/(S)-methyl-3-hydroxybutanoátu. Reakce byly vedeny ve vsádkovém tlakovém reaktoru při teplotě 303K a tlaku H_2 5MPa v rozpouštědle methanolu. Kationický komplex $[RuCl((R)\text{-binap})(p\text{-cymen})]Cl$ byl imobilizován pomocí heteropolykyseliny ($H_3PW_{12}O_{40}$) na oxidických materiálech ze skupiny zeolitů (beta, montmorillonit, mordenit, atd.) a různě aktivovaných formách Al_2O_3 (bazicky, neutrálně, mírně kyselé, kyselé). Práce je zaměřena na hledání ideálního nosiče, z jehož povrchu by se imobilizovaný katalyzátor neuvolňoval do reakčního média a jehož katalytické vlastnosti by byly zachovány v heterogenizované formě. Při katalytických testech byla sledována aktivita, selektivita (ee, selektivita vůči tvorbě acetalu) a množství vyloučeného komplexu (stanovení pomocí AAS). Rovněž byl zkoumán vliv acidity různě kyselé aktivovaných Al_2O_3 na průběh reakce a účinek přídavku malého množství vody na snížení tvorby acetalu.

Experimentální a termodynamické hodnocení stability alkylcyklohexanů při pyrolýze

Autor: Lucie Starkbaumová

Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické technologie

Školitel: Ing. Petr Zámotný Ph.D.

Substituované cyklické uhlovodíky jsou typickou komponentou benzinových surovin pro průmyslovou ethylenovou pyrolýzu. Ačkoliv přibližnou skladbu produktů pyrolýzy některých členů této skupiny lze nalézt v literatuře, dosud chybí ucelenější studie vlivu délky, počtu a vzájemné polohy substituentů na stabilitu a skladbu produktů. Tato práce byla zaměřena na studium monoalkylcyklohexanů a jejich porovnání s cyklohexanem z hlediska reaktivity, selektivity primárního štěpení i výtěžků průmyslově zajímavých produktů. Laboratorní experimenty byly prováděny na aparatuře pyrolýzní chromatografie Shimadzu Pyr-4A za podmínek blízkých se průmyslové pyrolýze i při nižší konverzi pro výzkum mechanismu primárního štěpení. Reaktivita jednotlivých testovaných uhlovodíků byla porovnávána na základě závislosti jejich konverze na teplotě. Výsledky měření byly konfrontovány se stabilitou odhadnutou z termodynamických dat. Reaktivita uhlovodíků roste v řadě cyklohexan, methylcyklohexan, ethylcyklohexan, propylcyklohexan. Mechanismy štěpení testovaných látek byly sestaveny na základě předpokladu dlouhých propagačních řetězců s uvažováním β -štěpení a izomeračních radikálových reakcí. Reakční schémata poskytla vysvětlení vzniku všech pozorovaných produktů.

Katalyzátor pro hydrogenolýzu methylesterů mastných kyselin.

Autor: Andrej Poliščuk

Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické technologie

Školitel: Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Hydrogenolýza methylesterů mastných kyselin je průmyslově realizovanou technologií mastných alkoholů, které jsou žádanou surovinou ve výrobě tenzidů. Uvedená hydrogenolytická reakce je nejčastěji urychlována měďnatochromitými katalyzátory Adkinsova typu nebo měďnatými katalyzátory s obsahem zinečnaté složky. Rozpouštění kovové mědi kyselými reakčními meziprodukty je jedním z problémů této průmyslové syntézy. Nalezení korozněodolnějšího katalyzátoru, v porovnání s Cu-Cr katalyzátorem v současné době užívaným ve fy SASAL, ze sortimentu fy Eurosupport Litvínov bylo výsledkem studia, prezentované I. Dudkovou v minulém roce.

Pokus o vysvětlení funkce cesia na zvýšení odolnosti měděné složky v kyselém prostředí a možnost jeho náhrady levnější složkou bylo úkolem této práce. Podrobnou analýzou parametrické citlivosti vybraných procesních parametrů technologie katalyzátoru byly zjištěny příčiny dobré kyselostní stability průmyslového katalyzátoru ESM 491 v technologii mastných alkoholů. Cesná složka nemá původně předpokládaný vliv na korozní odolnost měděné složky a může být ze skladby katalyzátoru odstraněna pokud neplní funkci aktivního promotoru, jako v případě katalyzátoru pro nízkoteplotní konverzi.

HPLC/MS tělních tekutin – nový rozměr v medicíně diagnostice

Autor: Lukáš Chytil
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer, Ph.D., Ing. Marek Kuzma

V posledních letech došlo k prudkému vývoji v oblasti hmotnostní spektrometrie. Příčinou se stalo objevení nových ionizačních technik (ESI, MALDI), které posunuly parametry hmotnostního rozsahu ($> 1\,000\text{ kD}$) a citlivosti detekce (fmol/l) k hodnotám, v kterých jsou přítomny metabolity a další látky v tělních tekutinách, čímž došlo k expanzi této techniky do biologie a medicíny. Kombinace selektivní a citlivé detekční metody (MS) s vysoce účinnou separační technikou jakou představuje kapalinová chromatografie (HPLC) tak nabízí zcela nový nástroj v diagnostice onemocnění a monitoringu procesů odehrávajících se v živém organismu. V předložené práci bude na třech konkrétních problematikách demonstrována metoda HPLC/MS jako vysoce účinný nástroj v medicíně diagnostice. Úvodní studie budou věnovány analýze dechového kondenzátu, jehož složení odráží procesy bezprostředně se odehrávající v plicích. Metabolity kyseliny arachidonové – leukotrieny a isoprostany – obsažené v této tělní tekutině byly použity jako markery pro diagnostiku *asthma bronchiale*, případně monitoring oxidativního stresu. Třetí problematika bude věnována monitoringu koncentrací důležitých látek (aminokyseliny, neurotransmitery) v krevní plazmě při zátěžových testech na aplikovaný intravenózně podávaný inzulin.

Studium povrchových komplexů v heterogenní katalýze

Autor: David Karhánek
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitelé: Ing. Petr Kačer, Ph.D.; Ing. Marek Kuzma

Molekulární modelování v oblastech nejen homogenní, ale i heterogenní katalýzy nabývá na významu. Umožňuje objasnit již známé a predikovat neznámé reakční meziprodukty i kompletní reakční mechanismy probíhající na katalyzátorech.

Tato práce se zabývá teoretickým studiem adsorbovaných struktur nenasycených látek na katalyzátorech na bázi platinových kovů. Organometalické komplexy nulvalentní platiny ($\text{olefinPt(PPh}_3)_2$) byly vybrány jako zjednodušený model k reálnému kovovému systému.

Vliv struktury substrátu na adsorptivitu olefinických látek je vyhodnocen srovnáním síly vazeb Pt-C v obou modelech. To je docíleno výpočtem adsorpčních energií na povrchu Pt(111) v prostředí programu VASP (Vienna Ab-Initio Simulation Package) a disociačních energií di- vazeb ($\eta^2\text{-olefin}$)-Pt v organokovových sloučeninách pomocí programu Gaussian 03[®].

V praktickém důsledku metoda může pomoci bez nutnosti experimentu určit energetický profil a selektivitu hydrogenace směsi nenasycených látek na ideálním kovovém katalyzátoru. Projekt byl řešen ve spolupráci s Ústavem materiálové fyziky při Universität Wien (Rakousko).

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: ORGANICKÁ CHEMIE I

Ústav organické chemie, 26.11.2004

Zahájení v 8.30, budova A, místnost č. 250

Komise (ústav 110):

Doc. Ing. František Hampl, CSc. (VŠCHT) - předseda

Ing. Václav Šťastný (VŠCHT) - organizační tajemník

Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc. (VŠCHT)

Ing. Josef Hromas (Chemopharma, a.s.)

Ing. Rudolf Smrž CSc. (Synthon, s.r.o.)

Ing. Hanuš Slavík (EASTMAN Sokolov a.s.)

Ing. Pavel Šebek, CSc. (Zentiva, a.s.)

Mgr. Miroslav Havránek, Ph.D. (Re&d VÚFB. a.s.)

Přihlášeno: 7 účastníků

Anna Kovářová *Nesymetrické banánovité kapalně krystalické na bázi substituovaných naftalen-2,7-diolů*

Michal Kohout *Lomené kapalně krystalické na bázi derivátů 7-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny*

Martin Havlík *Příprava polyfluorovaného zirkonacyklopentadienu na bázi 1,8-bis(perfluorhexyl)okt-4-ynu a jeho využití*

Petr Macháček *Příprava a teoretické studium organozinečnatých sloučenin na bázi fluorhaloethenů*

Ondřej Baszczyński *Příprava prekursorů a teoretické studium 1-heteracyklopentanů a jejich derivátů*

Jaroslav Padevět *Aminokarbenové komplexy chromu jako nukleofily při asymetrické Pd - katalyzované allylové substituci*

Václav Dekoj *Syntéza substituovaných triptycenů*

Nesymetrické banánovité kapalné krystaly na bázi substituovaných naftalen-2,7-diolů

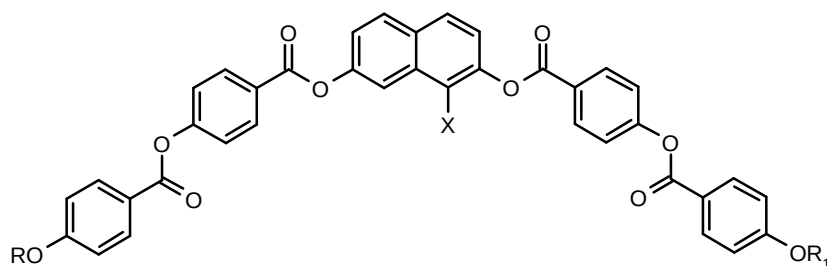
Autor : Anna Kovářová

Ročník : 5.

Ústav : Ústav organické chemie

Školitel : ing. Václav Kozmík, CSc.

V naší pracovní skupině byly syntetizovány a podrobně zkoumány symetrické kapalné krystaly s centrálním jádrem na bázi 1-substituovaných naftalen-2,7-diolů. Zjistili jsme, že vykazují zajímavé mesomorfní chování s výskytem různých typů tzv. B-fází. Mým úkolem bylo rozšířit tyto studie o nesymetrické deriváty obsahující jedno polymerizovatelné místo v koncovém alifatickém řetězci molekuly a studovat vliv substituce jádra a zavedených bočních řetězců na mesomorfní chování získaných materiálů.



X = Cl, CH₃, CN

R = C₁₀H₂₁, C₁₂H₂₅, (CH₂)₉CH=CH₂

R₁ = C₁₀H₂₁, (CH₂)₉CH=CH₂

Lomené kapalné krystaly na bázi derivátů 7-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny

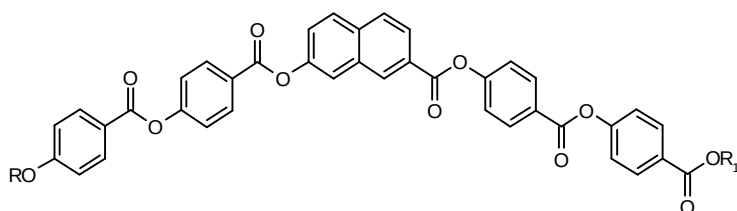
Autor: Michal Kohout

Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Cílem této práce byl design a syntéza nových nesymetrických banánovitých kapalných krystalů, u nichž je jako centrálního jádra využita 7-hydroxynaftalen-2-karboxylová kyselina. Bude diskutována syntéza centrálního jádra i výstavba cílových struktur. Mesomorfní chování nových materiálů bude studováno pomocí DSC, studií textur, elektrooptickými studiemi a rentgenostrukturní analýzou. Dále bude diskutován vliv změny centrálního jádra a délky postranních řetězců, včetně řetězců obsahujících polymerizovatelné místo, na celkové změny v mesomorfním chování jednotlivých členů v připravené sérii nových látek.



R₁ = C₈H₁₇, C₁₀H₂₁, C₁₂H₂₅, C₁₄H₂₉, C₁₁H₂₁

R₂ = C₈H₁₇, C₁₀H₂₁, C₁₂H₂₅, C₁₄H₂₉, C₁₁H₂₁

Příprava polyfluorovaného zirkonacyklopentadienu na bázi 1,8-bis(perfluorhexyl)okt-4-ynu a jeho využití

Autor: Martin Havlík

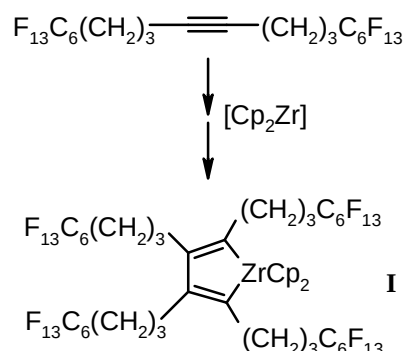
Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Polyfluorované acetyleny s dvěma perfluoralkylovými řetězci izolovanými od trojné vazby ethylenovou nebo trimethylenovou spojkou jsou perspektivní stavební bloky v organické syntéze. Klíčovými intermediáty těchto reakcí jsou polyfluorované trifláty. S pomocí 1,8-bis(perfluorhexyl)okt-4-ynu jsem tak připravil modifikované cyklopentadieny, butadien a benzen se čtyřmi polyfluoralkylovými řetězci. Syntéza využívá zirkonacyklopentadienový komplex I jako klíčový intermediát.

Práce byla provedena za podpory GA AV ČR (grant č. A407220361)



Příprava a teoretické studium organozinečnatých sloučenin na bázi fluorhaloethenů

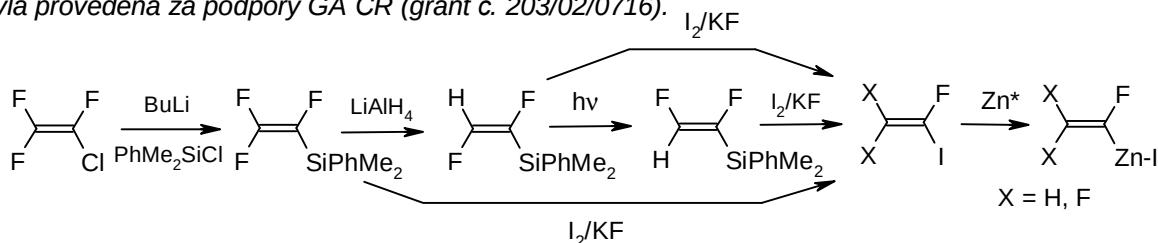
Autor: Petr Macháček

Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Organozinečnaté sloučeniny odvozené od fluor(halo)ethenů jsou vhodné jako selektivní činidla pro zavedení trifluorethenylové, (Z)- nebo (E)-1,2-difluorethenylové skupiny do organických substrátů. Připravil jsem 3 výchozí fluorjodetheny (Schéma 1) a podrobil je reakcím s aktivním zinkem za vzniku odpovídajících fluorovaných organozinečnatých sloučenin. Tyto sloučeniny jsem nechal reagovat s modelovými elektrofilními činidly. Zároveň jsem pro tyto tři organokovy vypočetl pomocí DFT metod ¹⁹F NMR posuny a F-F interakční konstanty izolovaných molekul i molekul v přítomnosti simulovaného rozpouštědla. Vypočtené hodnoty jsem porovnal s naměřenými experimentálními hodnotami. Práce byla provedena za podpory GA ČR (grant č. 203/02/0716).



Příprava prekursorů a teoretické studium 1-heteracyklopentanů a jejich derivátů

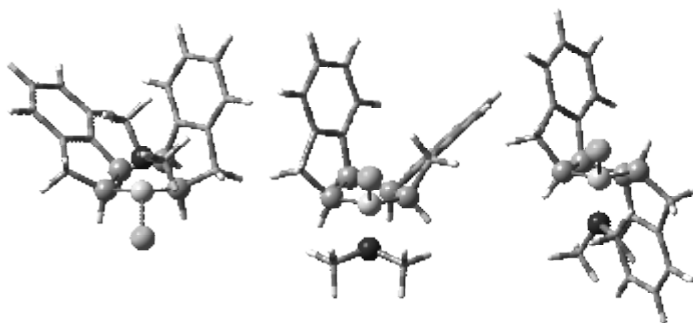
Autor: Ondřej Baszczyński

Ročník: 4.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

C₂-symetrické chirální sloučeniny jsou perspektivními chirálními činidly. Do této skupiny patří i poměrně nové látky na bázi 1-heteracyklopentanů. Klíčovým krokem pro syntézu těchto látek je reakce 1,4-bifunkčních organokovových činidel s vhodnými elektrofilů. Cílem této práce byla příprava intermediátů, diolů a dibromidů, pro tyto organokovy. Dále jsem vypočítal pomocí *ab initio* a DFT metod energie rovnovážných geometrií stereoisomerů substituovaných 1-chlor-1-boracyklopentanů. Přitom jsem simuloval rozpouštědlo přidavkem explicitní molekuly dimethyletheru a metodou self-konzistentního reakčního pole. Práce byla provedena za podpory GA ČR (grant č.203/03/0496).



Aminokarbenové komplexy chromu jako nukleofily při asymetrické Pd - katalyzované allylové substituci

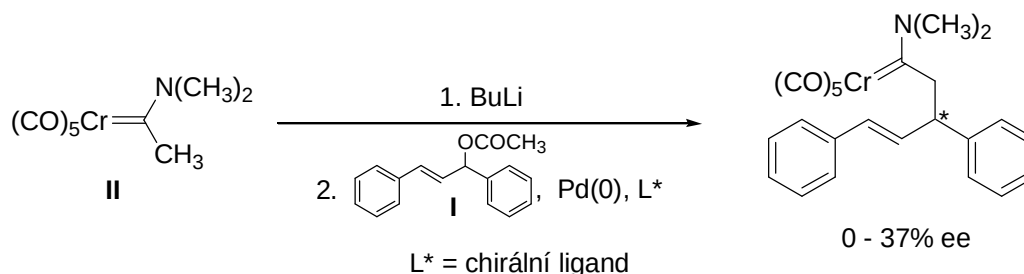
Autor: Jaroslav Padevět

Ročník: 4.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Dalimil Dvořák CSc.,

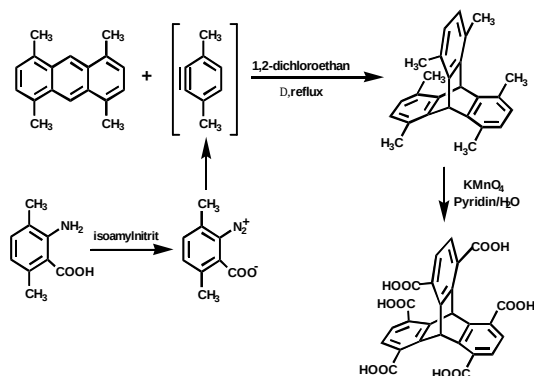
Asymetrická indukce byla studována na reakci (1,3-difenylallyl)-acetátu **I** s aniontem aminokarbenového komplexu **II** v přítomnosti Pd₂(dba)₃.CHCl₃ jako zdroje palladia a různých chirálních ligandů. Nejúčinnější se ukázal (R)-(+)-BINAP·PdCl₂ a Pfaltzův katalyzátor, zatímco bisoxazolinové ligandy byly neúčinné. Průběh reakce silně záleží na povaze rozpouštědla.



Syntéza substituovaných triptycenů

Autor: Václav Dekoj
Ročník: 5.
Ústav: ÚOCHB AV ČR
Školitel: Ing. Martin Bělohradský, CSc.

Triptycenové deriváty s různým počtem *para*-disubstituovaných aromatických jader tvoří zajímavé stavební bloky pro supramolekulární samoskladebné útvary. Syntéza těchto látek vychází



z odpovídajících methylovaných anthracenů. Adicí arynu generovaného z dimethylantranilové kyseliny na methylované anthraceny získáme methylované triptyceny, které je možné využít pro další transformace. Lze připravit triptycenkarboxylové kyseliny, snadno přístupné jsou i halogenmethyl deriváty. Uvedený postup umožňuje přípravu různých *para*-substituovaných triptycenů v gramových množstvích, což z těchto látek činí atraktivní synthony pro využití v supramolekulární chemii.

Finanční podpora: GA ČR (203/03/0087).

Literatura: Pakusch J., Ruechardt Ch.: Chem. Ber. 123 (1990) 2147

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: ORGANICKÁ CHEMIE II

Ústav organické chemie, 26.11.2004

Zahájení v cca 11.30, budova A, místnost č. 250

Komise (ústav 110):

Prof. Ing. Ivan Stibor, CSc. (VŠCHT) - předseda

Ing. Václav Šťastný (VŠCHT)- tajemník

Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc. (VŠCHT)

Doc. Ing. Dalimil Dvořák CSc. (VŠCHT)

Ing. Josef Hromas (Chemopharma, a.s.)

Ing. Rudolf Smrž CSc. (Synthon, s.r.o.)

Ing. Hanuš Slavík (EASTMAN Sokolov a.s.)

Ing. Pavel Šebek, CSc. (Zentiva, a.s.)

Mgr. Miroslav Havránek, Ph.D. (Re&d VÚFB. a.s.)

Přihlášeno: 7 účastníků

Tomáš Šmejkal	<i>Syntéza thiactalix[4]arenů s rozšířenou kavitou</i>
Zbyněk Hasník	<i>O⁶-Adukty guaninu jako indikátory poškození DNA</i>
Martin Krupička	<i>Stereochemie a konformace tetraarylorthouhličitanů</i>
Jan Rohlíček	<i>MCE - software pro interpretaci solvatace krystalických lékových forem</i>
Petr Kolář	<i>Strukturní studium Risedronátu sodného</i>
Jana Roháčová	<i>Elektrochemie aminokarbenových komplexů chromu</i>
Radek Jurok	<i>Koordinace Ni²⁺ iontů k lipofilním alkyl(pyridin-2-yl) ketoximům jako "sonda" pro studium vlastností micelárních systémů</i>

Syntéza thiacalix[4]arenů s rozšířenou kavitou

Autor: Tomáš Šmejkal

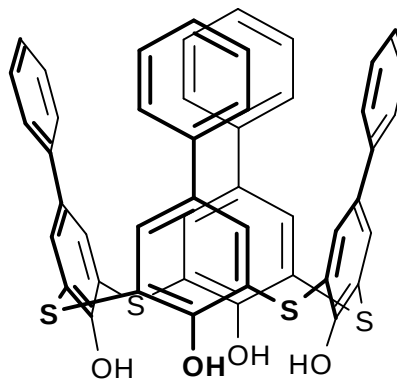
Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Tato práce se zabývá přípravou 5,11,17,23-tetrafenylthiacalix[4]arenu kondenzační reakcí bifeny-4-olu se sírou. Produkt reakce představuje zcela nový thiacalixarenový derivát se zvětšenou aromatickou kavitou.

Alkylace spodního okraje tohoto nového thiacalix[4]arenu vede k tetraalkylovaným derivátům, jejichž konformační preference byly studovány pomocí ^1H NMR spektroskopie a rentgenostrukturní analýzy. Zatímco příslušné tetramethoxy- a tetraethoxy- deriváty jsou za normální teploty konformačně mobilní (termodynamická směs konformerů v roztoku CDCl_3), připravené tetrapropoxy- a ethoxykarbonylmethoxy- deriváty existují již za identických podmínek (25°C , CDCl_3) ve stabilní konformaci.



O⁶-Adukty guaninu jako indikátory poškození DNA

Autor: Zbyněk Hasník

Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Jedním z reaktivních intermediátů v metabolismu styrenu je styren-3,4-oxid, který je schopen atakovat nukleofilní centra v nukleosidech. Modifikované base podléhají depurinaci a následně jsou z těla vyloučeny močí, kde mohou sloužit jako indikátory poškození DNA.

Cílem mé práce je příprava syntetických standardů pro diagnostiku poškození DNA. Zejména jde o O⁶-(4-vinylfenyl)guanin, který vzniká atakem styren-3,4-oxidu na exocyklickém kyslíku guaninu. Prokázal jsem, že tento derivát guaninu lze připravit z 2-amino-6-chlorpurinu po následné aktivaci chloru pomocí 1,4-diazabicyklo[2.2.2]oktanu (DABCO) a následnou substitucí 4-vinylfenolátem. Pro srovnání reaktivity aromatického a alifatického alkoholátu jsem připravil O⁶-(2-fenylethyl)guanin jako příklad aduktu alifatického alkoholu.

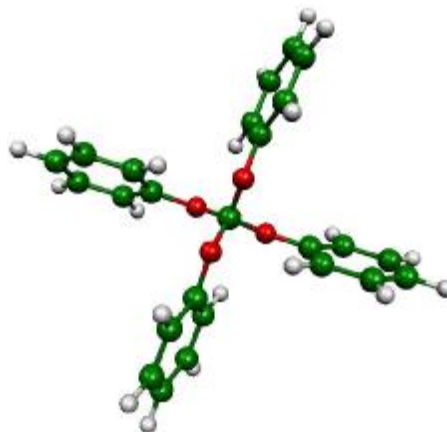
Stereochemie a konformace tetraarylorthouhličitánů

Autor: Martin Krupička
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: doc. ing. Stanislav Böhm, CSc.

V DFT výpočtech i v krystalu vykazuje struktura tetrafenoxymethanu propelerní konformaci. Cíle práce:

- analýza symetrie molekuly
- určení pravděpodobných konformací
- nalezení izomeračních mechanismů
- přiřazení NMR spektra

Po zpracování výše uvedených bodů bude navržena vhodná substituce skeletu s cílem pozorování stereochemie prostřednictvím NMR v kapalně fázi.



MCE - software pro interpretaci solvatace krystalických lékových forem

Autor: Jan Rohlíček
Ročník: 4.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: ing. Michal Hušák Ph.D.

Při charakterizaci krystalických forem organických látek, je důležité znát přesné informace o interakcích mezi molekulami v mřížce, obsahu solventů a interakcích základní molekuly se solventem. Výsledky RTG strukturní analýzy standardně popisují pouze nezbytně velkou část prostoru krystalu – tzv. asymetrickou část základní buňky. Pro interpretaci mezimolekulárních interakcí je nutné na základě znalostí vlastností prostorových grup a symetrie mřížky vygenerovat větší počet molekul tvořící krystal. Program MCE umožňuje interaktivně generovat větší části prostoru krystalu, zobrazovat elektronové hustoty a mapy volného prostoru v krystalu. V praxi byl program testován při interpretaci solvatace immunosupresivní látky cyklosporin A.

Strukturní studium Risedronátu sodného

Autor: Petr Kolář
Ročník: 3.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Hana Petříčková

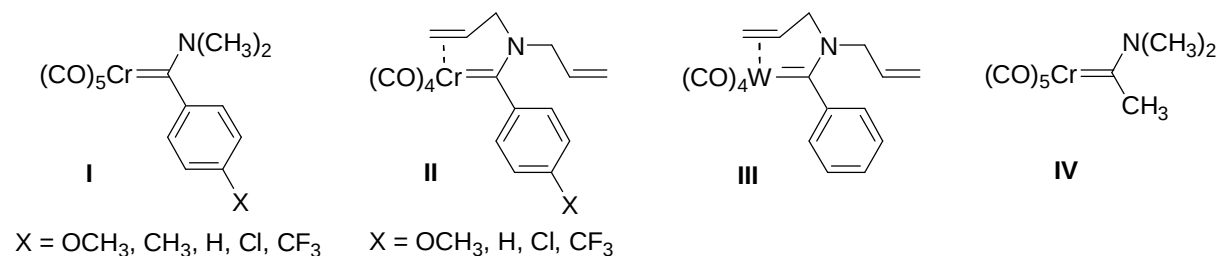
Farmaceuticky aktivní substance jsou velmi často podávány v pevné lékové formě (např. tabletě). Charakteristické pro tyto látky je výskyt ve více krystalových modifikacích, tzv. polymorfie. Je nezbytné, s ohledem na účinnost a biodostupnost, polymorfii studovat, protože jednotlivé polymorfy dané aktivní substance mají odlišné vlastnosti (rozpuštnost, b.t., atd...). V prezentované práci bude ukázáno strukturní studium Risedronátu sodného, který se v moderní medicíně užívá jako účinná látka v léčbě osteoporózy.

Byla studována stabilita polymorfu H risedronátu sodného v závislosti na teplotě. Změny krystalové struktury pak byly ověřeny RTG práškovou difrakcí. Bylo zjištěno, že forma H není stabilní, při sušení přechází na jiný polymorf. Protože tyto látky s oblibou poutají vodu, byl obsah vody stanovován pomocí termální analýzy.

Elektrochemie aminokarbenových komplexů chromu

Autor: Jana Roháčová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Dalimil Dvořák CSc., Ing. Irena Hoskovcová CSc.

Byly připraveny a elektrochemicky studovány dvě série aminokarbenových komplexů nesoucích substituovanou fenylovou skupinu na karbenovém atomu uhlíku: *N,N*-dimethylaminokarbenové komplexy **I** a chelatované η^2 -*N*-allyl-*N*-allylaminokarbenové komplexy **II**. Pro srovnání byl rovněž připraven komplex wolframu **III** a aminokarbenový komplex chromu nesoucí metylovou skupinu na karbenovém atomu uhlíku **IV**. Výsledky mimo jiné ukazují, že k redukci dochází na karbenovém atomu uhlíku, zatímco oxidace probíhá na kovu. Bude rovněž diskutován vliv substituce na redoxní děje.



Koordinace Ni^{2+} iontů k lipofilním alkyl(pyridin-2-yl)ketoximům jako "sonda" pro studium vlastností micelárních systémů

Autor: Radek Jurok
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: doc. Ing. František Hampl, CSc.

Využití micel různých tenzidů jako reakčního prostředí uvádí nesčetná literatura věnovaná fenoménu micelární katalýzy¹. Pozornost chemiků však byla dosud soustředěna na možnost ovlivnění průběhu reakcí strukturou micelárních katalyzátorů a příspěvek vlivu micelární matrice byl spíše zanedbáván. Přitom se ukazuje, že charakter nanoagregátu může ovlivnit rychlost chemické reakce o několik řádů². Racionální design micelárních katalyzátorů proto musí vycházet ze znalosti vlastností fázového rozhraní v různých typech nanoagregátů. Jako potenciální "sonda" pro studium těchto vlastností nanoagregátů se ukazuje koordinace Ni^{2+} iontů k lipofilním alkyl(pyridin-2-yl)ketoximům.

Literatura:

1. Např.: a) Fendler J. H.: *Membrane Mimetic Chemistry*. Wiley, New York, 1982; b) Reinhoudt D.(Ed.): *Comprehensive Supramolecular Chemistry*, Vol. 10, 267-360. Elsevier, Oxford, 1996; c) Shah D. O. (Ed.): *Micelles, Microemulsions, and Monolayers*. Dekker, New York, 1998.
2. Kivala M., Hampl F., Cibulka R., Liška F.: Hydrolýza organofosfátů funkcionalizovanými tenzidy: jak ovlivňuje struktura tenzidu a typ nanoagregátu pozorovanou reaktivitu? XXVII. Konference organických chemiků. Červen 2004, Pardubice.

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: Materiálové inženýrství

Ústav inženýrství pevných látek, 26.11.2004

Komise (ústav 126):

Doc. Ing. Jindřich Leitner, DrSc. – předseda

Ing. Petr Slepíčka – organizační tajemník

Doc. RNDr. Vladimír Rybka, DrSc.

Doc. Dr. Ing. David Sedmidubský

Ing. Barbora Doušová, CSc.

Přihlášeno: 6 účastníků

Eva Hrabovská	<i>Dielektrické a optické vlastnosti dotovaných polymerů</i>
Petr Paláček	<i>Planární optické vlnovody na bázi polymerů</i>
Jan Mrázek	<i>Příprava xerogelových vrstev se stříbrnými nanočásticemi metodou sol-gel</i>
Vladimír Kotál	<i>Povrchové modifikace polymerů</i>
Robert Král	<i>Studium vlastností PbI_2 pro rentgenové detektory</i>
Tomáš Brůha	<i>Studium systému As - Fe - SO_4^{2-} při dvoustupňovém srážení důlní vody z CVD Kaňk</i>

Dielektrické a optické vlastnosti dotovaných polymerů

Autor: Eva Hrabovská
Ročník: 3.
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Tomasz Podgrabinski

Pro některé aplikace je nutné zvýšit polaritu polymerních filmů. Jedna z metod, jak zvýšení docílit, je příprava kompozitů polymer-anorganické popř. organické polární aditivum. Tato práce se soustřeďuje na studium dielektrických a optických vlastností tenkých vrstev polymethylmetakrylátu (PMMA), PMMA dotovaného různými koncentracemi difenylsulfoxidu (DS) a polystyrenu (PS) připravovaných metodou spin coating. Pro měření hodnoty relativní permitivity (ϵ_r) byly připraveny struktury kov-polymer-kov (což vedlo ke vzniku deskového kondenzátoru) na skleněných destičkách, jako rozpouštědlo pro PMMA byl použit aceton a pro PS toluen. Zlaté kontakty byly opatřeny metodou katodového naprašování. Vrstvy pro optické měření byly připraveny na destičkách křemíkových, PMMA však musel být rozpouštěn v chloroformu, neboť vrstvy připravené z acetonu nebyly měřitelné. Z kapacitních měření bylo zjištěno, že dotací PMMA dochází ke zvýšení hodnoty ϵ_r . Zvyšování hodnoty ϵ_r bylo také pozorováno po zahřátí filmů z pokojové teploty na teplotu kolem T_g , při chlazení vzorku na pokojovou teplotu se film vrací s hysterezí na výchozí hodnotu ϵ_r . Při optických měřeních byly hlavně sledovány spektrální závislosti indexu lomu (n) vrstev a jeho změny v závislosti na druhu polymeru a přídávku dopantu.

Planární optické vlnovody na bázi polymerů

Autor: Petr Paláček
Ročník: 5.
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Doc. Ing. Ivan Hüttel, DrSc.

Práce se zabývá přípravou submikronových a mikronových polymerních vrstev polymethylmetakrylátu, rozpouštěného v chloroformu, případně polystyrenu, rozpouštěného v toluenu, kde oba polymery jsou dotovány permanentními dipóly na bázi organických bivalentních sloučenin boru. Po přidání dopantu do polymeru dojde ke zvýšení jeho relativní permitivity a tak i ke změně indexu lomu, což je s tloušťkou vrstvy základní studovaný parametr. Organické polymerní vlnovody mají poměrně malý útlum. Vrstvy, deponované na Si/SiO₂, jsou připravovány odstředováním z roztoku v elektrickém poli, kde se předpokládá orientace molekul dipólů v roztoku do směru stejnosměrného elektrického pole a že tato orientace zůstane i v konečné struktuře po odpaření rozpouštědla. Další předpoklad je změna indexu lomu orientovaných a neorientovaných filmů (se stejným stupněm dotace). Vypnutím či zapnutím elektrického pole během procesu přípravy se vytvoří dvě vrstvy s odlišným indexem lomu. Tyto kompozitní materiály jsou studovány pro přípravu optických planárních vlnovodů, a do budoucnosti případně pro přípravu takového vlnovodu v jednom technologickém cyklu. Tyto vlnovody jsou základní strukturou integrované optiky.

Příprava xerogelových vrstev se stříbrnými nanočásticemi metodou sol-gel

Autor: Jan Mrázek
Ročník: 5.
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Vlastimil Matějec, CSc., ÚRE AVČR

Pro optickou chemickou detekci mají stále větší význam struktury využívající povrchových plazmonů. Je známo, že povrchový plazmon může být excitován jednak v kovové vrstvě o tloušťce asi 50-70nm a jednak v kovových nanočásticích o srovnatelném průměru. Tento příspěvek je zaměřen na výzkum druhého přístupu, a to na sol-gel přípravu kovových stříbrných nanočástic zachycených v siloxanových vrstvách a na její vliv na strukturní a optické vlastnosti vrstev. K přípravě nanočástic byl použit dusičnan stříbrný a organicky modifikovaný siloxan (tj. fenyltriethoxysilan, propyltriethoxysilan a 3-aminopropyltriethoxysilan) jako stabilizátor. Vývoj nanočástic v závislosti na čase a reakčních podmínkách byl pozorován UV-VIS spektroskopií. Připravené nanočástice byly přidány do solu připraveného z tetraethoxysilanu. Gelové vrstvy byly nanášeny na planární substráty a na optická vlákna metodou spin-coating a dip-coating, které byly tepelně zpracovány v redukční atmosféře. Velikost stříbrných částic v matrici byla určena na elektronovém mikroskopu (SEM). Vrstvy na planárních substrátech byly charakterizovány spektrální elipsometrií. Pro vrstvy na optických vláknech byly zjištěny angulární distribuce a spektrální charakteristiky vláken ve viditelné oblasti spektra.

Povrchové modifikace polymerů

Autor: Vladimír Kotál
Ročník: 5.
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Petr Slepíčka

Modifikací povrchu polymeru lze ovlivnit vlastnosti následně deponované vrstvy kovu. V této práci je studována modifikace polymeru pomocí UV záření a plazmatického výboje. Cílem této práce bylo srovnání zvolených modifikačních metod a modifikovaných polymerů. Jako výchozí polymerní materiály byly použity folie polyethylenu (PE) a polyethylentereftalátu (PET) různých tloušťek. Rozsah modifikace byl studován v závislosti na době expozice (UV, plazma) a vzdálenosti vzorku od zdroje (UV). Při modifikaci vzorků pomocí plazmového (Ar) výboje byl další proměnnou degrační proud, na kterém závisí kinetická energie iontů. Změna polárního charakteru vzorků byla studována goniometricky. UV-VIS spektroskopií byly sledovány rozdíly v absorpci záření modifikovaných polymerů. Povrchová struktura modifikovaných polymerů byla zkoumána pomocí AFM mikroskopie. V další fázi bude přistoupeno k depozici kovů na modifikované polymery a charakterizaci deponované vrstvy v závislosti na stupni modifikace polymerního substrátu.

Studium vlastností PbI_2 pro rentgenové detektory

Autor: Robert Král
Ročník: 3.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Marie Matuchová, CSc., ÚRE AVČR

Jodid olovnatý patří k perspektivním rgt a γ detektorům, který pracuje v širokém rozmezí teplot od -200°C až do 130°C . Je vhodný pro zlepšení diagnostických metod, např. v medicíně a ekologii. Při jeho přípravě byla v této práci použita metoda přímé syntézy z olova a jodu v křemenné evakuované ampuli (10^{-3} - 10^{-4}Pa) při teplotě 700°C . Syntetizovaný materiál se dále čistil zonálním tavením. Ke studiu strukturních vlastností byla použita metoda řádkovací elektronové mikroskopie a rgt difrakce. Elektro-optické vlastnosti byly zkoumány pomocí nízkoteplotní fotoluminiscenční spektroskopie a měřením I-V charakteristik, z kterých se vyhodnocovala resistivita ρ . Rovněž byl studován vliv příměsí Ag a vzácných zemin, zejména Ho, Gd, Yb, Er na změnu charakteristických vlastností tohoto materiálu. Tyto prvky byly přidávány v elementární formě při syntetizování materiálu.

Studium systému As - Fe - SO_4^{2-} při dvoustupňovém srážení důlní vody z CVD Kaňk

Autor: Tomáš Brůha
Ročník: 5.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Barbora Doušová, CSc.

Důlní voda po bývalé těžbě rud z oblasti Kutné Hory je pro vysoké koncentrace arsenu ($> 50 \text{ mg/l}$) a ostatních iontů včetně železa (5000 mg/l) vážným problémem ohrožující životní prostředí. Cílem práce je nalézt rovnováhu As - Fe - SO_4^{2-} pro dvoustupňové čištění důlní vody. V prvním stupni se důlní voda sráží malým množstvím alkálie; na povrchu vznikajících oxidů hydroxidů železa (FeOOH – lepidokrokit, goethit, ferrihydrit a Fe_3O_4 – magnetit) se adsorbuje veškerý arsen. Po oddělení „toxické“ sraženiny se pak ve druhém stupni z důlní vody odstraní zbytek železa a ostatní ionty srážením hydroxidem vápenatým. Studium systému As - Fe - SO_4^{2-} v závislosti na pH umožňuje optimalizovat podmínky dvoustupňové dekontaminace důlní vody tak, aby se množství toxické sraženiny z prvního stupně snížilo na minimum při dodržení parametrů (především obsah síranů a pH) pro vodu vypouštěnou do vodoteče po druhém stupni.

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: ANORGANICKÉ NEKOVOVÉ MATERIÁLY I

Ústav skla a keramiky, 26.11.2004

Zahájení v 9:00 hodin, budova A, posluchárna A02

Komise (ústav 107):

Prof .Ing. Josef Matoušek, DrSc. - předseda

Ing. Eva Gregorová, CSc. - organizační tajemník

Doc. RNDr. Ondrej Gedeon, PhD.

Ing. Antonín Lisý, CSc.

Doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

Přihlášeno: 9 účastníků

Lenka Benešová:	<i>Ekologické aspekty syntézy zeolitů z popílků</i>
Romana Drobníková:	<i>Vliv oxidů vzácných zemin na vlastnosti křišťálových skel</i>
Lucie Fuitová:	<i>Sorbovatelnost As (V) na modifikovaném kaolinitu</i>
Roman Kačerovský:	<i>Tvarování skleněných desek pro konstrukci vesmírného teleskopu</i>
Radim Suchač:	<i>Vliv aditiv na tokové chování disperzí elektrárenských popílků</i>
Tomáš Štícha:	<i>Vliv složení a přípravy suspenzí na vlastnosti sanitární keramiky</i>
Kateřina Švarcová:	<i>Měření reologického chování koncentrovaných disperzních systémů</i>
Pavel Trtík:	<i>Škrobové lití korundové keramiky</i>
Renata Urbanová:	<i>Studium reologického chování keramických suspenzí na bázi ZrO₂</i>

Ekologické aspekty syntézy zeolitů z popílků

Autor: Lenka Benešová
Ročník: 4.
Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. David Koloušek, CSc.

V současné době přetrvává snaha o využití elektrárenských či teplárenských popílků v mnoha technologických procesech. Jistým módním trendem je v poslední době příprava zeolitových fází hydrotermální syntézou. Při těchto aplikacích alterovaného popílku jsou přehlížena možná negativa, spočívající v obsahu aniontových forem toxických kovů As a V, které po skončení syntézy mohou volně migrovat z hydrotermálně narušených popelovin. Zeolity byly připraveny ze třech popílků dvou zdrojů (mostecké a sokolovské uhlí) v prostředí 2M roztoku NaOH. Ve všech případech se podařilo syntetizovat zeolitové fáze (zeolit P či analcim), ale zároveň bylo zjištěno, že při promytí 90 g produktů připravených ze sokolovského či mosteckého zdroje 7.5 l respektive 13.5 l destilované vody nebylo dosaženo totálního vymytí As a V. Kromě těchto anionů byly rovněž sledovány změny koncentrace křemičitanu sodného a volného Na⁺ ve filtrátech. K významnému snížení koncentrace během promývacích cyklů docházelo pouze u produktu, kde vznikl analcim.

Vliv oxidů vzácných zemin na vlastnosti křišťálových skel

Autor: Romana Drobníková
Ročník: 5.
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 patří tyto prvky: cer, praseodym, neodym, promethium, samarium, europium, gadolinium, terbium, dysprosium, holmium, erbium, thulium, ytterbium a lutecium.

Se zvyšující se produkcí vzácných zemin v posledních letech, a tím i s poklesem ceny, se začínají tyto oxidy více používat ve sklářském průmyslu. Nejširší oblast použití představuje v současné době produkce optických skel, optických skleněných filtrů, skleněných vláken a laserových skel. Dále je využíváno barvicích a odbarvujících schopností některých oxidů, příp. jejich kombinací.

Dosavadní publikace zabývající se působením oxidů vzácných zemin jsou nedostačující. V literatuře jsou zmiňovány pouze optické vlastnosti. Proto je konečným cílem této práce rozšířit poznatky týkající se oxidů vzácných zemin o důležité parametry využitelné v technologické praxi – viskozitu, povrchové napětí, elektrickou vodivost, krystalizační a dilatometrické veličiny, hydrolytickou odolnost a L*, a*, b* souřadnice.

Tento úkol s aplikací na 26%ní olovnatý křišťál bude předmětem diplomové práce. Zde předkládaná práce se zabývá první částí tohoto úkolu – vlivu obsahu oxidů erbia a europia na některé z výše uvedených parametrů.

Sorbovatelnost As (V) na modifikovaném kaolinitu

Autor: Lucie Fuitová
Ročník: 4.
Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Barbora Doušová, CSc.

Tématem práce je sorpce As^{V} na upravené a neupravené jílové minerály. Jako sorbenty byly použity sedlecký kaolin a metakaolin. Sorpce aniontu As^{V} z vodných roztoků se prováděly na původních minerálech při pH přibližně 4,5 (pH výchozího roztoku AsO_4^{3-}), 7 a 8,5 (upraveno 1 M NaOH), a na minerálech upravených jednak ionty Fe^{2+} (sycením v 0,6 M $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) a jednak acidifikací (převedením do H cyklu kontaktem s 0,2 M HCl). Navážka sorbentů, při níž dochází k účinné sorpci As^{V} se pohybovala od 10 do 14 g/L. Doba ustanovení rovnováhy mezi pevnou a kapalnou fází byla 96 hodin.

Tvarování skleněných desek pro konstrukci vesmírného teleskopu

Autor: Roman Kačerovský
Ročník: 4.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr.Ing. Martin Míka

V současné době jsou ve vesmíru teleskopy s optickým systémem vybavené jedním dutým asférickým zrcadlem s rotačně symetrickým parabolicko-hyperbolickým tvarem (systém Wolter 1). Pro větší sběrnou plochu se vkládají souosá dutá Wolterova zrcadla. Rentgenové teleskopy typu Wolter 1 mají zorný úhel do 1° , proto je problémem vyhledávat krátkodobé záblesky rtg. záření, případně mapovat oblohu v reálném čase. To dává potřebu mít v kosmu umístěný celooblohový rentgenový objektiv, který umožňuje registraci a lokalizaci zdroje rtg. záření v reálném čase. Geometrie rentgenové optiky typu Lobster-eye (LE) umožňuje širokosáhlý výhled 1000 a více čtverečních stupňů. Zrcadla modulu jsou tvořeny boritokřemičitým sklem a pokrývají se vrstvou zlata. Požaduje se přesnost tvaru a mikrodrsnot povrchu, jež by měla být menší než 1 nm. V naší práci tvarujeme skleněné tabulky na formách z kompozitního materiálu, hledáme optimální teplotní podmínky, pro získání tvaru, který by dokonale kopíroval tvar formy, zároveň také sledujeme vliv teploty na kvalitu povrchu. Cílem je určit takový průběh ohřevu a maximální teplotu, aby se mikrodrsnost nezvyšovala a zůstala minimální a její hodnota byla pod 1 nm a zároveň získat tvar s minimální odchylkou od požadovaného teoretického tvaru.

Vliv aditiv na tokové chování disperzí elektrárenských popílků

Autor: Radim Suchač
Ročník: 3 Bc.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.,
Konzultant: Prof. Ing. F. Rieger, DrSc.

Hydraulická doprava elektrárenských popílků má řadu výhod v porovnání s mechanickou dopravou (spotřeba energie, výkonnost, ekologie atd.). Efektivita hydraulické dopravy roste s rostoucím obsahem popílků, resp. se zlepšenou tekutostí disperzního systému.

Práce se zabývá studiem vlivu typu a obsahu vybraných aditiv na tokové chování vodných disperzí elektrárenských popílků s cílem stanovení optimálního aditiva zvyšujícího tekutost disperzního systému. Pro vodné disperze elektrárenských popílků bylo měřeno reologické chování (rotační reometrie, RV1, ThermoHaake) a stanoveny závislosti základních reologických parametrů na typu a obsahu aditiv v disperzi. Na základě charakteru stanovených závislostí byl vybrán optimální typ a hmotnostní obsah studovaných aditiv.

Stanovené závislosti byly ověřeny měřením reologického chování odlišným typem reometru i senzoru (RHEOTEST 2, šroubový rotor) pro vyloučení případného efektu odstředování a sedimentace v průběhu reologických měření. Ověření naměřených výsledků bylo provedeno na modelovém míchacím zařízení pro koncentrované disperze bez aditiv a s vyhodnoceným optimálním přídatkem aditiva.

Vliv složení a přípravy suspenzí na vlastnosti sanitární keramiky

Autor: Tomáš Štícha
Ročník: 4.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Jiří Havrda, CSc, Ing. Jana Andertová, CSc.
Konzultant: Prof. Ing. F. Rieger, DrSc., Ing. T. Jirout

Práce se zabývá studiem vlivu změny složení licích suspenzí na konečné vlastnosti sanitární keramiky.

Cílem bylo změnou chemického složení připravovaných suspenzí docílit zlepšení mechanických vlastností vypálených vzorků při zachování rozměrových parametrů.

Úvodem byl sledován vliv změny hmotnostního obsahu Al_2O_3 a SiO_2 na fyzikálně-chemické a mechanické vlastnosti vypálených těles připravených technologií lití suspenze do porézní (sádrové) formy.

Součástí práce bylo také studium vlivu mechanického zpracování suspenze (míchání, mletí) na její fyzikálně-chemické vlastnosti (reologické chování, rozdělení velikosti částic atd.) i na fyzikálně-chemické a mechanické vlastnosti vypálených těles (objemová hmotnost, nasákavost, smrštění, pevnost v ohybu atd.).

Měření reologického chování koncentrovaných disperzních systémů

Autor: Kateřina Švarcová
Ročník: 4
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.
Konzultant: Prof. Ing. František Rieger, DrSc.

Práce se zabývá reometrií vodných suspenzí keramických směsí na bázi jílových surovin, ostřiv a taviv s cílem navržení optimálního uspořádání experimentálních podmínek stanovení reologického chování měřených soustav, tj. koncentrovaných disperzních systémů.

Reometrie vysoce koncentrovaných disperzních systémů může být zatížena chybami spojenými s vlastnostmi těchto systémů, např. rozdílná hustota jednotlivých složek (sedimentace nebo odstředování částic), vysoká konsistence směsi (obtížná manipulace při měření) atd.

Pozornost byla proto zaměřena jak na volbu vhodného měřicího zařízení (viskozimetr se souosými válci, válec nebo šroubové míchadlo v nádobě) a senzorů (rozdílný typ a velikost), tak i na vytipování optimálních experimentálních podmínek uvedených měření. Měření byla prováděna metodou rotační reometrie na odlišných typech reometrů.

Škrobové lití korundové keramiky

Autor: Pavel Trtík
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Škrobové lití keramiky patří mezi nové způsoby tvarování keramiky litím do neporézních forem. Tento způsob umožňuje v závislosti na použitém typu a množství škrobu přípravu keramiky s různým stupněm pórovitosti a velikosti pórů. Pomocí obrazové analýzy jsou charakterizovány tři typy škrobů (bramborový, kukuřičný a pšeničný) a je určena kinetika bobtnání v relevantní teplotní oblasti. Vodné licí suspenze jsou připraveny s obsahem korundu 80 a 78 hm.%. Obsah škrobu je 30 obj.% (vztaženo na obsah korundu). Reologické vlastnosti škrobové licí suspenze (viskoelastické chování) jsou charakterizovány pomocí oscilační reometrie. Vzorky porézní korundové keramiky jsou připraveny litím do kovových forem a jejich následným zahřátím. Prohřev suspenze je sledován pomocí termočlánků. Zatuhnuté vzorky jsou vypáleny na teplotu 1570°C a je u nich stanovena objemová hmotnost, zdánlivá a skutečná pórovitost a celkové smrštění tělesa. V závěru práce je provedeno porovnání vlivu typu použitého škrobu na vytvořenou pórovitost.

Studium reologického chování keramických suspenzí na bázi ZrO_2

Autor: Renata Urbanová
Ročník: 5
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.

Při přípravě keramických produktů je téměř ve všech tvarovacích procesech výchozí prášková směs dispergována v kapalně fázi. Kontrolovaný proces přípravy suspenzí s požadovanými reologickými vlastnostmi je základem řízení vytvářecího procesu a dosažení požadované mikrostruktury zajišťující optimální fyzikálně-chemické a mechanické vlastnosti vytvořených těles. Práce je zaměřena na studium koloidní reologie vodných suspenzí oxidových směsí na bázi ZrO_2 , resp. $\text{ZrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$. Bylo studováno reologické chování uvedených suspenzí rotační reometrií (RV1, ThermoHaake) při různém pH. Naměřené reologické závislosti byly fitovány rozdílnými reologickými modely s mezí toku s cílem nalezení optimálního modelu pro vystižení reologického chování, resp. pro vyjádření závislosti meze toku suspenze na jejím pH. Stanovené závislosti byly porovnány s přímým experimentálním stanovením meze toku (vane reometrie). Oblast maximálních hodnot meze toku odpovídá IEP (izoelektrickému bodu) dané suspenze. Správnost měření a vhodnost jednotlivých modelů pro vyjádření studovaných závislostí byla ověřena stanovením IEP suspenze na základě měření elektroforetické mobility částic (ESA, Matec MBS 8000). Měření byla doplněna studiem vlivu charakteru povrchu částic jednotlivých směsí (ESCA) na průběh měřených závislostí. Součástí práce bylo stanovení vlivu obsahu elektrolytu na chemické a fyzikálně-chemické vlastnosti suspenzí.

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: ANORGANICKÉ NEKOVOVÉ MATERIÁLY II

Ústav skla a keramiky, 26.11.2004

Zahájení v 9:00 hodin, budova A, posluchárna A02

Komise (ústav 105):

Doc. Ing. Martin Maryška, CSc. - předseda

Ing. Miroslav Rada, CSc. - organizační tajemník

Doc. Ing. Jaroslav Kutzendörfer, CSc.

Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst

Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Přihlášeno: 9 účastníků

Lukáš Brázda:	<i>Příprava bioaktivních vrstev na Ti-slitině určené pro kostní implantáty</i>
Jiří Duchoslav:	<i>Vrstvy s obsahem Ag připravené metodou sol - gel</i>
Stanislava Janáková:	<i>Ag⁺ planární vlnovody v substrátech obsahujících Er³⁺ a Yb³⁺</i>
Petra Kinclová:	<i>Vápenné malty modifikované polymery - studium pomocí SEM</i>
František Lahodný:	<i>Skla pro fotoniku dopovaná Er₂O₃ a Yb₂O₃</i>
Anna Svobodová:	<i>Systém analýzy cementářského slínku - vybrané metody</i>
Silvie Švarcová:	<i>Protonově vodivá organicko-anorganická skla</i>
Martina Virágová:	<i>Studium vlhkostní roztažnosti keramického střepu</i>
Jitka Zimová:	<i>Mechanické vlastnosti keramiky na bázi Al₂O₃ - ZrO₂</i>

Příprava bioaktivních vrstev na Ti-slitině určené pro kostní implantáty

Autor: Lukáš Brázda
Ročník: 4.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Aleš Helebrant, CSc.
Konzultanti: Ing. Helena Hradecká, Ing. Renata Horváthová

Bioaktivní skelné a sklokeramické materiály mohou po implantaci do živého organismu vytvářet přímou vazbu s kostní tkání prostřednictvím tvorby fosforečnanů vápenatých, zejména hydroxyapatitu v prostředí tělních tekutin. Jejich použití je však omezeno v případech, kdy je implantát mechanicky zatěžován. Oproti tomu kovové implantáty (např. Ti a jeho slitiny) se vyznačují dobrými mechanickými vlastnostmi, ale jako bioinertní materiály nevytvářejí přímou vazbu s kostí. Snahou je proto vytvořit na Ti-slitinách bioaktivní povrch a sloučit tak jejich dobré mechanické vlastnosti s bioaktivními vlastnostmi vytvořené vrstvy. Předložená práce navazuje na práce zabývající se úpravou povrchu Ti-slitin loužením ve vápenato-fosforečných roztocích s různým poměrem Ca/P iontů. Vzhledem k údajům v literatuře, kdy je uváděna primární úloha Ca iontů v počátku precipitace vrstvy, byla v této práci použita postupná expozice vzorků z Ti-slitiny (Ti-6Al-4V) nejprve ve vápenatém roztoku (1-3 dny, výchozí pH upraveno na 2,5-4,5) a následně v roztoku fosforečnanu (1 den) s cílem vytvořit na povrchu vzorku tenkou vrstvu vápenatých fosforečnanů. Byl sledován vliv délky expozice a pH výchozích vápenatých roztoků na rychlost růstu vápenato-fosforečných vrstev na povrchu vzorku a na poměr Ca/P ve vytvořených vrstvách. V loužicích roztocích byla sledována změna koncentrace vápenatých resp. fosforečnanových iontů pomocí metody AAS resp. spektrofotometricky, povrch vzorků byl hodnocen optickým a elektronovým mikroskopem s EDS mikroanalýzou.

Vrstvy s obsahem Ag připravené metodou sol - gel

Autor: Jiří Duchoslav
Ročník: 4.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Helena Hradecká, Prof. Ing. Josef Matoušek, CSc.

Stříbrné vrstvy připravené metodou sol-gel mohou nacházet uplatnění v praxi nejen jako vrstvy barevné, ale předmětem výzkumu se stávají např. i jejich antibakteriální a fotokatalytické účinky či schopnosti zlepšovat optické a elektrické vlastnosti substrátů. Cílem předložené práce bylo ověřit postupy přípravy barevných Ag vrstev pomocí metody sol-gel na 2 typech skleněného substrátu. Jako prekurzor byl použit tetraethoxysilan (TEOS), jehož hydrolýza probíhala v prostředí organického rozpouštědla s kyselým katalyzátorem (HNO_3), zdrojem Ag byl vodný roztok AgNO_3 o různé koncentraci. Vrstva byla nanášena na sklo metodou dip-coating a následně sušena a vypalována v peci. Modifikací postupu uvedeného v literatuře a optimalizací podmínek přípravy (doby odležení solu, rychlosti potahování skel, teploty a doby výpalu) byly získány homogenní žluté vrstvy o různé intenzitě zabarvení. Kvalita vrstev byla sledována vizuálně a pomocí optického mikroskopu, barevnost vrstev byla hodnocena spektrofotometricky.

Ag⁺ planární vlnovody v substrátech obsahujících Er³⁺ a Yb³⁺

Autor: Stanislava Janáková

Ročník: 4.

Ústav skla a keramiky, Ústav anorganické chemie

Školitel: RNDr. J. Špírková, Ing. L. Salavcová

Práce se zabývá přípravou aktivních optických vrstev v silikátových sklech obsahujících ionty vzácných zemin, které by mohly sloužit jako optické zesilovače či vlnovodné lasery. Planární optické vlnovody byly připraveny iontovou výměnou $\text{Ag}^+ \leftrightarrow \text{Na}^+$. Pro zajištění aktivní funkce vlnovodu je v tomto případě využita emise Er^{3+} iontů na 1.5 μm . Použité materiály mají relativně vysoký obsah Er^{3+} iontů a proměnlivý obsah iontů Yb^{3+} (0 až 15 hm.%). U těchto nově navržených skel byl především sledován účinek yterbia na aktivní vlastnosti připraveného vlnovodu, tj. předpokládané rozšíření absorpčního pásu v okolí 980nm (zvýšení efektivity čerpání) a následné zvýšení intensity emise. Zároveň byly porovnány vlastnosti vlnovodů v substrátech obsahujících Er^{3+} a Yb^{3+} se substráty, jenž obsahují pouze Er^{3+} ionty. Snahou bylo také nalézt vhodné podmínky pro přípravu málovidových vlnovodů v nových substrátech a zjistit jak různý obsah vzácných zemin v substrátech ovlivní jejich propustnost pro vyměřované ionty. Měření absorpčních a luminiscenčních spekter (FZÚ AV ČR) prokázala výrazné rozšíření čerpacího pásu blízko 980 nm i ovlivnění výsledné emise u skel s přídavkem yterbia.

Vápenné malty modifikované polymery – studium pomocí SEM

Autor: Petra Kinclová

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky, Ústav chemické technologie restaurování památek

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

Konzultant Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

Vápenné malty se používají především na objekty spadající pod památkovou péči z důvodu historické autentičnosti. Vykazují však špatné mechanické vlastnosti a krátkou životnost. Modifikace polymery výrazně zlepšuje vlastnosti vápenných malt, a to především pevnosti v tlaku a ohybu, odolnost vůči mrazovému poškození a odolnost vůči krystalizaci solí. Mechanismus působení polymerů ve vápenných maltách však dosud nebyl objasněn. Práce zabývající se mechanismem působení polymeru v cementových maltách se přiklání k čistě fyzikálnímu působení polymeru na mikrostrukturu a zanedbávají chemickou podstatu.

Tato práce je zaměřena na změny mikrostruktury způsobené polymerem ve vápenných maltách. Pro srovnání se použilo více druhů komerčně dostupných polymerních redispergovatelných prášků. Obsah polymeru vzhledem k pojivu byl zvolen u všech druhů mezi 5 až 7,5 %hm., a to z důvodu nejlepších naměřených mechanických vlastností při tomto zastoupení. Navíc byl připraven vzorek s 30-ti % procenty polymeru, u kterého se očekávaly dobře viditelné změny struktury.

Snímky ze SEM prokázaly výrazný strukturní vliv pouze při 30-ti % zastoupení. Byla pozorována kompaktnější struktura a především přemostění mikrotrhlinek mikrovlákný. Společným rysem pro modifikované vzorky byl poměrně hojný výskyt hexagonálních destiček, které byly identifikovány jako dobře vyvinuté krystalky $\text{Ca}(\text{OH})_2$, což poukazuje na nedokončenou karbonataci.

Skla pro fotoniku dopovaná Er_2O_3 a Yb_2O_3

Autor: František Lahodný
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Cílem práce je vývoj nových optických skel pro použití v integrovaných optických systémech a dalších optických segmentech jako jsou např. vlnovody a zesilovače optického signálu. Za účelem přípravy aktivních optických vlnovodů byla již prostudována celá řada různých skel. Velkým problémem u těchto skel obsahujících erbium je mnohdy špatná kvantová účinnost způsobená nedokonalým přenosem budící energie na atomy aktivního prvku, čímž se mnohdy významně snižuje velikost populace úspěšně excitovaných fotonů. Lepšího transferu excitační energie na Er^{3+} bez navýšení výkonu budícího laseru lze dosáhnout přidáním dopujícího "partnera", který snáze přejímá energii a tu pak efektivně předává iontům Er^{3+} . K tomuto účelu nejlépe slouží trojmocné ionty yterbia dopované současně s Er^{3+} do hostitelského materiálu. Tato práce se zabývá přípravou křemičitých skel dopovaných ionty erbia a yterbia, vykazujících vlastnosti laserově aktivního prostředí. Hledáno je optimální složení skla, především pak vzájemný poměr $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$. Vychází se z požadavků nízkých ztrát optického signálu ve vlastním aktivním komponentu, vysoký zisk při zesílení, dostatečnou šířku pásma v oblasti $1,5\text{ }\mu\text{m}$ a dostatečnou dobu života emise. V laboratorní peci byla připravena řada sodnohliníto-křemičitých skel s rozdílným obsahem dopujících kationů. Z odlitků byly připraveny vzorky s povrchem o vysoké optické kvalitě a byla změřeny optické parametry připravených skel.

Systém analýzy cementářského slínku – vybrané metody

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

Analýza slínku je nedílnou součástí kontroly při výrobě portlandského cementu. V současné době se při pálení slínku využívá ve stále větším rozsahu alternativních paliv, která ovlivňují proces pálení a vnášejí do něj další příměsi, především těžké kovy. Tyto vlivy se pak mohou projevit v chemickém i mineralogickém složení cementářského slínku, což vyžaduje inovaci současného systému analýzy slínku. Je třeba vyvinout systém zahrnující nové vlivy a schopný pracovat v reálném čase. V této práci je navrhováno využití některých metod pro rozšíření systému hodnocení cementářského slínku. RTG fluorescenční analýzou je sledováno celkové chemické složení slínku s důrazem na zastoupení těžkých kovů. RTG difrakční prášková analýza je používána ke kvalitativnímu i kvantitativní stanovení (Rietveldova analýza) jednotlivých modifikací slínkových minerálů. K oběma vyhodnocením RTG difrakčních spekter je využíván program High Score X'Pert Plus. Pro stanovení lokalizace určitých těžkých kovů v určitých slínkových minerálech se prověřuje možnost využití elektronové mikroskopie.

Těžké kovy ve slínku mohou mít vliv nejen na výslednou kvalitu cementu, ale i na zdraví lidí s cementem pracujících. Z tohoto důvodu se zavádí nové hygienické normy a zpřesňují se metody stanovení vyluhovatelnosti některých těžkých kovů z cementu. Proto je součástí této práce i vývoj metodiky pro stanovení vyluhovatelnosti Cr^{VI} z cementu.

Systém hodnocení cementářského slínku bude využit při sledování vlivů procesních parametrů na složení cementářských slínků české provenience. Projekt je podporován Svazem výrobců cementu ČR.

Protonově vodivá organicko-anorganická skla

Autor: Silvie Švarcová
Ročník: 4.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr.Ing. Martin Míka

Nově vyvíjená hybridní organicko-anorganická protonově vodivá skla jsou slibným materiálem pro membrány ve středně teplotních H_2/O_2 palivových článcích. Palivové články představují nový efektivní a ekologický zdroj elektrické energie. Jsou to vysoce účinná elektrochemická zařízení, neboť převádějí chemickou energii reakce přímo na elektrickou energii bez potřeby mechanické části. Odpadním produktem procesu je voda. Nejdůležitějším parametrem vyvíjených organicko-anorganických membrán je elektrická vodivost. Pro určení elektrické vodivosti byla použita metoda impedanční spektroskopie umožňující rozlišení impedance objemové fáze membrány a impedance rozhraní membrána-elektroda. Impedance byla měřena dvoubodovou metodou s Pt – elektrodami v závislosti na frekvenci (1MHz–10mHz) a teplotě (20-120°C). Měření byla prováděna při relativní vlhkosti vzduchu v laboratoři 35-45%. Interpretace získaných impedančních spekter byla prováděna s využitím náhradních obvodů, jejichž parametry byly určeny komplexní analýzou, což umožnilo přesné stanovení odporu membrány. Připravené membrány vykazují vysokou protonovou vodivost (jednotky S/m) i za nízkých hodnot relativní vlhkosti, tzn. nemusí být neustále udržovány v hydratovaném stavu.

Studium vlhkostní roztažnosti keramického střepu

Autor: Martina Virágová
Ročník: 5
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc., Doc. Ing. Vladimír Hanykýř, DrSc.

Při výpalu keramické směsi pro pórovinové obkládačky s relativně vysokým obsahem jílových surovin probíhají v jílových minerálech procesy vedoucí ke změně jejich složení a postupné ztrátě původní krystalické struktury. Výsledkem těchto reakcí mohou být stabilní krystalické minerály. V podmínkách rychlovýpalu však vedle těchto minerálů je ve střepu relativně vysoký obsah nezreagovaných nekystalických fází, jež se vyznačují sníženou odolností proti působení vlhkosti. Dochází k jejich postupné rehydrataci spojené s nevratným zvětšením objemu střepu. Tento proces je určitým projevem stárnutí těchto střepů. Nevratná vlhkostní roztažnost je důležitou vlastností pórovitých keramických materiálů zejména pórovinových obkládaček, protože dodatečné zvětšení objemu střepu může vyvolat nežádoucí napětí ve vrstvě glazury vedoucí až k jejímu trhlinkování. Je proto nezbytné tuto vlastnost sledovat a regulovat.

V práci byla studována vlhkostní roztažnost střepu na několika vzorcích jednožárových pórovinových obkládaček tuzemské současné produkce. Byly hodnoceny základní vlastnosti vypáleného střepu a porovnáno mineralogické a chemické složení. Metoda pro stanovení vlhkostní roztažnosti keramiky byla doplněna termickou analýzou a RTG difrakční analýzou.

Mechanické vlastnosti keramiky na bázi Al_2O_3 - ZrO_2

Autor: Jitka Zimová
Ročník: 4
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.
Konzultant: Ing. Miroslav Liška

K perspektivním keramickým materiálům se řadí tzv. transformačně zpevněná keramika na bázi Al_2O_3 – ZrO_2 označovaná jako ZTA keramika (Zirconia Toughened Alumina). Hlavní předností těchto materiálů jsou špičkové mechanické vlastnosti (vysoké hodnoty pevnosti, odolnost proti korozi atd.), proto nachází uplatnění v mnoha inženýrských aplikacích.

Práce se zabývá studiem mechanických vlastností směsné oxidové keramiky na bázi Al_2O_3 a ZrO_2 (s obsahem cca 90 % hm. Al_2O_3).

Základem experimentu je hodnocení vlivu přísadky barvicích oxidů (niklu, kobaltu, manganu) na vybrané mechanické vlastnosti těchto materiálů – tvrdost podle Vickerse, pevnost v ohybu, odolnost proti otryskávání abrazivními materiály atd. Součástí práce je studium creepového chování (deformace keramických materiálů při působení konstantního napětí za izotermních podmínek) studovaných materiálů při pokojové teplotě a při teplotě 1200° C.

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: ANORGANICKÁ TECHNOLOGIE

Ústav anorganické technologie, 26.11.2004

Zahájení v 9:00 hodin, budova A, místnost č. 32

Komise (ústav 105):

Doc. Dr.Ing. Josef Krýsa - předseda

Ing. Miloslav Lhotka, PhD. - organizační tajemník

Ing. Ivona Sedlářová

Dr.Ing. Vlastimil Fíla

Ing. Martin Paidar, PhD.

Přihlášeno: 4 účastníci, 6 příspěvků

- | | |
|------------------------|--|
| Tomáš Bystroň | <i>Vliv amoniaku na redukci kyslíku na Pt elektrodě
Potenciálově kontrolovaná výměna iontů v polypyrrolovém filmu</i> |
| Petra Müllerová | <i>Vlivy uplatňující se při reakci apatitu Kola s kyselinou trihydrogenfosforečnou</i> |
| Vladimír Navara | <i>Separace lehkých uhlovodíků a CO₂ na tubulárních zeolitických membránách
Příprava a charakterizace silikonových membrán vhodných pro separaci CO₂</i> |
| Martin Zlámal | <i>Studium fotokatalytických vlastností a příprava tenkých povrchů obsahujících oxid titaničitý</i> |

Vliv amoniaku na redukci kyslíku na Pt elektrodě

Autor: Tomáš Bystroň
Ročník: V.
Ústav: Department of Materials Technology, NTNU, Norway
Školitel: Prof. Reidar Tunold

Nejčastějším tématem prací zabývajících se problematikou elektrokatalýzy v palivovém článku typu PEM je téma oxidace vodíku na anodě. Významnější energetické ztráty jsou však spojeny s katodickou reakcí v O₂/H₂ palivovém článku. Jedním z možných zdrojů vodíku je amoniak, ten je nutno před vstupem do palivového článku reformovat za vzniku N₂ a H₂. Při nedokonalé reformaci se NH₃ hromadí uvnitř palivového článku. Jeho negativní vliv na anodickou reakci byl již prokázán. V naší práci jsme se pokusili objasnit, jak je přítomností amoniaku ovlivněna redukce kyslíku na katodě. Měření probíhala na leštěné Pt rotační diskové elektrodě ve vodném roztoku H₂SO₄ s různými přídávky NH₃. pH elektrolytu bylo udržováno konstantní při všech experimentech. V závislosti na vloženém potenciálu může být povrch Pt pokryt oxidy či nikoli. Čistý Pt povrch je elektrochemicky výrazně aktivnější. Vliv amoniaku na redukci kyslíku je zřetelný zejména na čistém Pt povrchu. Dochází zde k výraznému nárůstu přepětí odpovídající změně Tafelovy směrnice v oblasti nízkých proudových hustot z -60mV/dec na -90mV/dec již při velmi nízkých koncentracích. Tafelova směrnice v oblasti vysokých proudových hustot se nemění. Na Pt pokryté oxidy je naopak ovlivněna oblast vysokých proudových hustot, ale celkový vliv amoniaku je méně zřetelný. Negativní efekt amoniaku byl prokázán rovněž při testování v PEM palivových článcích.

Potenciálově kontrolovaná výměna iontů v polypyrrolovém filmu

Autor: Tomáš Bystroň
Ročník: V.
Ústav: Ústav anorganická technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Polypyrrol (PPy) patří již několik desetiletí k nejstudovanějším vodivým polymerům. Je to dáno jeho snadnou přípravou, dobrými mechanickými vlastnostmi, chemickou odolností a vysokou elektrickou vodivostí. Při syntéze PPy elektrochemickou oxidací pyrrolu z roztoku dochází k zabudovávání aniontů nosného elektrolytu do PPy struktury. Následná polarizace PPy filmu vede k výměně iontů mezi roztokem a polymerem. Mechanismus transportu iontů není dosud zcela jasný. Existuje zjednodušená přestava, podle které se výměny účastní přednostně anionty. Ty při oxidaci filmu migrují z objemu elektrolytu do struktury filmu. Naopak při redukci se uvolňují zpět do roztoku. Cílem naší práce bylo stanovit skutečný podíl náboje přenášený jednotlivými ionty. Pro tento účel byla použita technika cyklické voltametrie (CV) v kombinaci s EQCM (Elektrochemické krystalové nanováhy). Měření byly prováděny v prostředí bezvodého acetonitrilu. Toto prostředí bylo zvoleno z důvodu minimalizace vlivu solvatačního obalu iontů na vlastní měření. Jako nejvhodnější pro studium byly vybrány chloristany alkalických kovů. Ze změn hmotnosti v závislosti na prošlém náboji byly vypočteny převodová čísla pro jednotlivé ionty. Výsledky experimentů potvrdily účast obou iontů na přenosu náboje a umožnily vyhodnotit vliv kationtu na transportní vlastnosti v PPy.

Vlivy uplatňující se při reakci apatitu Kola s kyselinou trihydrogenfosforečnou

Autor: Petra Müllerová
Ročník: V.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc. Ing. Jan Vídenský, CSc.

Reakce přírodních fosfátů s kyselinou trihydrogenfosforečnou má význam při výrobě fosforečných hnojiv. Uplatňuje se ve výchozí technologické operaci při níž dochází k převedení vodonerozpustné formy fosforu na formu vodorozpustnou, tedy pro rostliny asimilovatelnou. Pro optimalizaci rozkladných zařízení z hlediska maximálního využití fosforu nebo pro návrh nových je potřebná znalost kinetiky reakčního systému. Jedná se o heterogenní nekatalyzovanou reakci mezi pevnou a kapalnou fází při níž vznikají rozpustné produkty. Všechny experimenty byly provedeny ve vsádkovém izotermním míchaném reaktoru s frakcí částic apatitu Kola o rozměrech 0,20 – 0,25 mm. K reakci byla použita kyselina trihydrogenfosforečná v takovém přebytku, že se její koncentrace během rozkladu prakticky neměnila. Průběh rozkladu byl sledován vážením nezreagovaného zbytku apatitu po přerušení reakce. Výsledkem provedených měření jsou závislosti stupně konverze na čase. Experimentální údaje byly zpracovány pomocí vztahů odvozených na základě modelové představy nezreagovaného jádra pro zmenšující se částici s použitím kinetické rovnice mocninného typu. Z naměřených experimentálních dat vyplývá, že reakční rychlost s rostoucí koncentrací kyseliny trihydrogenfosforečné v rozmezí 102,4 – 6812 mol/m³ a s rostoucí teplotou v intervalu od 293 do 333 K roste. Byly stanoveny hodnoty zdánlivého řádu reakce a zdánlivé aktivační energie.

Studium fotokatalytických vlastností a příprava tenkých povrchů obsahujících oxid titaničitý

Autor: Martin Zlámal
Ročník: V.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc. Dr. Ing. Josef Krýsa

Principem fotokatalýzy je absorpce UV záření v částicích polovodiče (TiO₂) a tvorba OH radikálů, které mohou odbourávat i stabilní organické látky. Toho lze využít jednak při čištění odpadních vod a plynů a jednak při odstraňování pachů a bakterií ze vzduchu. Základním předpokladem praktického použití je snadná separovatelnost čištěného média od fotokatalyzátoru, čehož lze dosáhnout nanesením tenké vrstvy na pevný nosič nebo zabudováním do matrice pojiva. Jako modelová látka bylo pro většinu měření použito barvivo acid oranž. Pouze v případě testování spárovací hmoty bylo vzhledem k vysoké alkalitě nutno použít 4-chlorfenol. Na vodivý nosič lze nanášet částice TiO₂ elektroforeticky z jejich suspenze v methanolu. V případě nevodivých nosičů (sklo, keramika) je vhodná sedimentace popř. nanášení štětcem. Tenké vrstvy TiO₂ připravené výše uvedeným způsobem měly dobré fotokatalytické vlastnosti, avšak měly nižší mechanickou odolnost než vrstvy připravené z komerčně dostupných výrobků, jejichž základem je kyselina peroxotitaničitá. Dále byly měřeny fotoaktivity nátěrů a vrstev na bázi vodního skla obsahujících TiO₂ a sledován vliv tepelné úpravy.

Separace lehkých uhlovodíků a CO₂ na tubulárních zeolitických membránách

Autor: Vladimír Navara
Ročník: IV.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

V posledních letech je věnována značná pozornost výzkumu a vývoji anorganických membrán umožňujících realizovat membránové separační procesy rovněž při vyšších teplotách a v chemicky agresivním prostředí. Tyto membrány nachází uplatnění jak v separátorech tak membránových reaktorech, kde mohou být použity k ovlivnění průběhu chemických reakcí.

V rámci této práce byla provedena charakterizace kompozitních cylindrických membrán typu zeolit MFI – nosič Al₂O₃, které byly připraveny ve spolupráci s IRC ve Villeurbanne (Francie). Permeační měření byla provedena v průtočné cele typu Wicke-Kallenbach. Byl sledován vliv teploty, průtoku plynů, experimentálního uspořádání (soproudé a protiproudé uspořádání), tlakového spádu, nosiče a složení směsi na permeační a separační charakteristiky membrány. Experimenty byly provedeny pro jednosložkové (He, N₂, CO₂, CH₄, Ar) i vícesložkové systémy (CO₂, CH₄ x Ar; nC₄, CH₄ x Ar). Na základě jednosložkových měření byla určena střední velikost póru 23,4 nm a poměr porozity ku tortuositě 0,21. Na základě měření ve vícesložkových systémech byly stanoveny separační faktory pro systémy CO₂ - CH₄ a CH₄ - nC₄, které se pohybovali v rozmezí 1,6 až 2,5, respektive 6,0 až 8,0 v závislosti na experimentálním uspořádání a teplotě.

Příprava a charakterizace silikonových membrán vhodných pro separaci CO₂

Autor: Vladimír Navara
Ročník: IV.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Neporézní polymerní membrány jsou v dnešní době nejrozšířenějším typem membrán, přičemž vedle reverzní osmózy se prosazují také při separaci plynů. Silikon je jedním z často používaných polymerů pro syntézu neporézních membrán. Tento typ membrán vykazuje poměrně vysokou permeabilitu pro CO₂ a na základě dostupných experimentálních výsledků se jeví jako vhodný materiál pro odstraňování CO₂ z plyných směsí, čehož může být využíváno zejména při ochraně životního prostředí.

Ve spolupráci s kolegy z FAU Erlangen byly vyvinuty nové postupy pro syntézu neporézních polymerních membrán s aktivní silikonovou vrstvou. Připravené membrány byly charakterizovány pomocí permeačních měření a porovnávány s komerčně dostupnými membránami. Permeační měření byla provedena jak pro jednosložkové plyny (CO₂, N₂, He) tak i pro binární směsi (CO₂-N₂).

Připravené membrány vykazovaly přibližně desetkrát vyšší permeabilitu pro CO₂ proti N₂ při teplotě 25°C a zároveň vykazovaly vyšší selektivitu než membrány komerčně dostupné.

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: ANORGANICKÁ CHEMIE

Ústav anorganické chemie, 26.11.2004

Zahájení v 9:00 hodin, budova A, posluchárna A20

Komise (ústav 101):

Doc. Ing. Vlastimil Brožek, CSc. – předseda

Ing. Pavlína Třešňáková, Ph.D. - organizační tajemník

Doc. RNDr. Josef Stejskal, CSc.

Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Ing. Dana Berková, CSc.

Dr. RNDr. Karel Knížek

prom. chem. Ivan Jirka, CSc.

Ing. Ivan Kašík, CSc.

Přihlášeno: 10 účastníků, 10 prací

Ondřej Beneš	<i>Struktura pyrochlorů a jejich termodynamické vlastnosti</i>
Ondřej Bučina	<i>Monokrystaly manganitů na bázi bismutu dopované lantanem</i>
Petra Čermáková	<i>Snižování fotoaktivity kalcinátů titanové běloby</i>
Martin Hlavsa	<i>Vliv fotoaktivního oxidu titaničitého na tepelnou a světelnou stabilitu směsí PVC</i>
Eva Májová	<i>Vliv velikosti částic CuO na vlastnosti supravodivé fáze Bi-2223</i>
Hana Malichová	<i>Tenké optické vrstvy v silikátových sklech obsahující Cu⁺</i>
Stanislav Rubáš	<i>Možnosti přípravy tenké optické vrstvy obsahující Er³⁺ v povrchu silikátového skla</i>

- Blanka Švecová** *Vliv nehomogenity skla na přípravu a vlastnosti K^+ planárních optických vlnovodů ve sklech obsahujících Er^{3+} ionty*
- Petr Tomeš** *Stanovení oblasti stability tuhých roztoků v systému $La_{0.55-x}Bi_xSr_{0.45}MnO_3$*
- Jaroslav Prokop** *Využití vysokofrekvenčních reaktivních plazmových technologií v procesu přípravy skleněných substrátů*

Struktura pyrochlorů a jejich termodynamické vlastnosti

Autor: Ondřej Beneš
Ročník: 5.
Ustav: Anorganická chemie
Školitel: David Sedmidubský

V minulých letech bylo velikou motivací pro vědce z celého světa najít novou a bezpečnou metodu likvidace vyhořelého jaderného paliva a radioaktivních materiálů z prošlých jaderných zbraní. Jedním z řešení se ukázala imobilizace těchto aktinoidů s dlouhým poločasem rozpadu kationtovou substitucí do matric sloučenin s pyrochlorovou strukturou. Tato pyrochlorová struktura se vytvoří substitucí částí zirkonia lantanoidy (Neodym, Gadolinium) do kubického oxidu zirkoničitého, uspořádáním kationů a kýlkových vakancí vzniklých v důsledku zachování elektroneutality. Získáme tak například $\text{Gd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ či $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$. Po provedení substituce radioaktivními prvky (Am, Cu, Np) se získá jednofázová oblast se základním vzorcem $\text{Ac}_x\text{Ln}_{2-x}\text{Zr}_2\text{O}_7$. Takto lze substituovat do maximálních hodnot pro $x=0,1$. Dalším zvyšováním poměru Ac:Ln na úkor lanthanoidu dochází k destabilizaci systému, což je velice nežádoucí. V důsledku dlouholeté stálosti těchto radioaktivních izotopů je velice důležité znát veškeré vlastnosti těchto matric, kde termodynamika hraje velkou roli. Cílem této práce bylo jednak určení stability těchto materiálů na základě struktury, jednak měření jejich tepelné kapacity do vysokých teplot. Stálost připravených materiálů při dlouhodobější expozici v normální atmosféře byla testována termogravimetricky.

Monokrystaly manganitů na bázi bismutu dopované lantanem

Autor: Ondřej Bučina
Ročník: 5.
Ústav: Anorganická chemie
Školitel: Prof. Ing. Miloš Nevřiva, DrSc.

Struktura manganitů se obecně odvozuje od kubické perovskitové struktury ABO_3 ($\text{A} = \text{Bi, La, Sr, Ca}$; $\text{B} = \text{Mn}$). Poměr trojmocného prvku (Bi, La) a dvojmocného prvku (Sr, Ca) určuje poměr iontů $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$, který má zásadní vliv na charakteristické vlastnosti těchto látek. Zatímco manganity na bázi lantanu jsou za běžných podmínek feromagnetické kovy, manganity na bázi bismutu jsou za antiiferomagnetické izolátory s nábojovým uspořádáním pod transformační teplotou. Částečná substituce iontů Bi^{3+} za La^{3+} může vést k feromagnetickým sloučeninám s nábojovým uspořádáním. Úkolem práce je tedy optimalizovat postup pro pěstování monokrystalů manganitů dopovaných lantanem. Monokrystaly manganitů se s ohledem na inkongruentní charakter jejich tání obecně připravují metodou růstu krystalů z vysokoteplotních tavenin. Výchozí látky SrMnO_3 , MnO_2 , Bi_2O_3 a La_2O_3 byly smíšeny ve stechiometrických poměrech a byly stanoveny teploty likvidu a eutektického tání připravených směsí. Jako tavivo byl použit Bi_2O_3 . Fázové a chemické složení bylo stanoveno RTG-difrakční analýzou, resp. atomovou absorpční spektroskopií.

Snížování fotoaktivity kalcinátů titanové běloby

Autor: Petra Čermáková
Ročník: IV.
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: ing. Zlatko Šrank, CSc.
ing. Libor Mastný, CSc.

Práce se týká vlivu přítomnosti vybraných cizích iontů v krystalové mřížce rutilu na míru fotoaktivity oxidu titaničitého, který je základní složkou titanové běloby. Cílem studie bylo sledování vlivu přídatku hlinitých, draselných a zinečnatých iontů v různých koncentracích na míru fotoaktivity kalcinátů rutilového typu.

Fotokatalytické účinky byly posuzovány na základě změny optických parametrů tenkých filmů laboratorně připravených kalcinátů vybarvených 1-nitroso-2-naftolem a exponovaných UV zdrojem. Provedená měření potvrdila již známý fakt, že přídavek hlinitých iontů vede ke snížení míry fotoaktivity oxidu titaničitého. Překvapivé však bylo zjištění, že stejného efektu je možno docílit i přídavkem zinečnatých iontů, a to již při výrazně nižší koncentraci, než je tomu u iontů hlinitých. Výsledky týkající se vlivu draselných iontů na fotokatalytické účinky jsou v současné době zpracovávány.

Výše uvedené výsledky je možno v technické praxi využít při výrobě titanových bělob rutilového typu, u nichž se obvykle vyžaduje nižší míra fotoaktivity. Tento užitečný parametr má vliv na destrukci pojivových systémů, a tím na životnost i vzhled výrobků vybarvených titanovou bělobou.

Vliv fotoaktivního oxidu titaničitého na tepelnou a světelnou stabilitu směsí PVC

Autor: Martin Hlavsa
Ročník: IV.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: ing. Libor Mastný, CSc.
ing. Zlatko Šrank, CSc.

V oblasti zpracování plastů patří titanová běloba k nejpoužívanějším anorganickým pigmentům. Při nízkém dávkování zajistí svojí výbornou kryvostí a bělostí nejen požadovaný bílý odstín vzorku, ale zároveň poskytne plastu dostatečnou ochranu vůči destruktivním účinkům UV záření.

Každý systém, skládající se z pigmentu a PVC, podléhá při expozici vlivům povětrnosti (teplo, světlo). Protože stabilita pigmentu je podstatně vyšší než PVC, je životnost polymeru rozhodující pro životnost celého systému. V současnosti narůstá tendence využít i fotokatalytických účinků oxidu titaničitého, které jsou v případě pigmentového typu považovány za negativní. Jedním z typů fotokatalytického oxidu titaničitého je Degussa P-25. Protože jeho původní částice jsou extrémně malé, je obtížné ho používat jako pigment.

V práci byl sledován vliv přítomnosti oxidu titaničitého P-25 na tepelnou a světelnou stabilitu neměkčených směsí PVC. Stabilizované i nestabilizované směsi byly vystaveny tepelnému namáhání při 180 °C ve vzduchu popř. exponovány UV zářením s dominantní vlnovou délkou 360, resp. 254 nm. Vliv přítomnosti oxidu titaničitého Degussa P-25 v PVC byl hodnocen na základě změn optických parametrů během expozice směsí a jejich zbytkové tepelné stability po ozáření.

Vliv velikosti částic CuO na vlastnosti supravodivé fáze Bi-2223

Autor: Eva Májová

Ročník: 3. ročník

Ústav anorganické chemie

Školitel: Doc. Ing. Olga Smrčková, CSc.

Vlastnosti supravodivých materiálů jsou závislé jak na složení tak na mikrostruktuře. Vzhledem k tomu, že závislost vlastností supravodiče Bi – Sr – Ca – Cu – O na složení je systematicky studována, byla v této práci pozornost věnována mikrostruktuře a jejímu vlivu na vlastnosti materiálu. Cílem bylo zjistit, jak se změny magnetické a elektrické vlastnosti (kritická teplota, kritická proudová hustota), bude-li na přípravu standardů stechiometrického složení $\text{Bi}_{1,6}\text{Pb}_{0,4}\text{Sr}_2\text{Ca}_{2,5}\text{Cu}_{3,5}\text{O}_x$ (tzv. fáze Bi-2223, $T_c = 110$ K) použít práškový CuO s rozdílnou velikostí částic. Předpokládané zvýšení kompaktnosti materiálu by mělo ovlivnit transportní vlastnosti supravodiče.

Zmenšení velikosti částic bylo dosaženo mletím v kulovém mlýnku a ve vibračním mlýnku s rotačním nožem po dobu 20 až 60 minut. Na základě analýzy částic výchozího CuO a fotografií z elektronového mikroskopu byly vybrány podíly s nejmenší velikostí částic. Ze zvolených prekurzorů byly připraveny vzorky supravodiče standardní reakcí v pevné fázi (technologický postup: mletí 10 minut, 1. kalcinace 24 hodin při teplotě 800°C, mletí 5 minut, 2. kalcinace při teplotě 800°C po dobu 24 hodin, mletí 5 minut, lisování tablet 5 minut při tlaku 800 MPa a slinování tablet při teplotě 840°C po dobu 168 hodin). U takto připravených vzorků byly změřeny teplotní závislosti kritické proudové hustoty a elektrického odporu a pórovitost.

Tenké optické vrstvy v silikátových sklech obsahující Cu^+

Autor: Hana Malichová

Ročník: 3.

Ústav: Ústav anorganické chemie

Školitel: Ing. Pavlína Třešňáková, Ph.D.

V posledních letech se objevuje zvýšený zájem o aktivní fotonické součástky (vlnovodné lasery) pracující v oblasti viditelného optického záření. Jednou z nejzajímavějších možností jejich přípravy je použití iontů Cu^+ , které mají charakteristickou fotoluminiscenci v modrozelené oblasti spektra. V této práci byl řešen problém přípravy tenkých optických vrstev obsahujících výhradně měď v oxidačním stavu I, která by měla zajistit dvě základní funkce fotonické struktury: a) aktivní funkci (silná modrozelená luminiscence), b) pasivní funkci (zvýšení indexu lomu a vnik vlnovodu). Experimentální vzorky byly připravovány termickými iontovými výměnami z tavenin obsahujících měďné soli do povrchu silikátových skel. Základním problémem bylo potlačení oxidace Cu^+ na Cu^{2+} . Vlastnosti připravených vzorků byly měřeny následujícími metodami: EPR (přítomnost Cu^{2+}), fotoluminiscenční spektra ve viditelné oblasti (přítomnost a koordinace Cu^+), vidová spektroskopie (vlnovodné vlastnosti) a SEM (složení povrchových vrstev). Nejlepší výsledky (intenzivní luminiscence a 7 vedených vidů) byly dosaženy s použitím taveniny $\text{CuI}+\text{ZnCl}_2$ a speciálního skla s vysokým obsahem Na_2O .

Možnosti přípravy tenké optické vrstvy obsahující Er^{3+} v povrchu silikátového skla

Autor: Stanislav Rubáš
Ročník: 3.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavlína Třešňáková, Ph.D.

Silikátová skla obsahující erbité ionty patří k nejperspektivnějším materiálům pro optické zesilovače a vlnovodné lasery pracující na telekomunikačních vlnových délkách. Aby nedocházelo k interakci laserově aktivních iontů v celém objemu substrátu je vhodnější, aby byly tyto ionty obsaženy pouze ve „funkční“, vlnovodné oblasti. V této práci byl řešen problém difúze Er^{3+} do povrchů speciálních kompaktních a porézních silikátových skel. Dotace Er^{3+} do povrchů kompaktních skel byla prováděna čistě termickou difúzí a termickou difúzí v elektrickém poli z tavenin obsahujících erbité soli. V případě porézních skel byla prováděna sorpce Er^{3+} z roztoků koordinačních sloučenin; skla pak byla následně žíhána na vysoké teploty. Pro vyhodnocení výsledků experimentů byly použity SEM, optická mikroskopie, RBS, vidová spektroskopie a měření emisních spekter při 1550 nm. Použití elektrického pole umožnilo difúzi Er^{3+} do všech typů použitých skel. Využití komplexních sloučenin pravděpodobně vede k homogenní distribuci Er^{3+} v povrchu porézních skel, jak o tom svědčí intenzivní emisní pásy v oblasti 1550 nm.

Vliv nehomogenity skla na přípravu a vlastnosti K^+ planárních optických vlnovodů ve sklech obsahujících Er^{3+} ionty

Autor: Blanka Švecová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: RNDr. J. Špírková, Ing. L. Salavcová

Tato práce se zabývá studiem přípravy aktivních optických vlnovodů v nových typech skleněných substrátů a charakterizací jejich vlastností. Tyto optické vrstvy mohou potenciálně sloužit jako optické zesilovače nebo vlnovodné lasery. Vlnovody byly připraveny iontovou výměnou K^+ (tavenina) $\leftrightarrow$ Na^+ (sklo) v silikátových optických sklech s vysokým obsahem Er^{3+} iontů. Tyto ionty se využívají pro svou emisi na vlnové délce 1.5 μm , na druhou stranu ovšem jejich obsah zvyšuje viskozitu skla, a tím i jeho nehomogenitu (vznikají šlíry). To se negativně projeví i nerovnoměrným průběhem iontové výměny (vzniká nehomogenní vlnovod). Náplní této studie bylo připravit a charakterizovat vlnovody ve sklech podobného složení, která se ale výrazně liší technologickým postupem přípravy (za účelem zvýšení homogenity). Ve výsledcích bude diskutován jak vliv množství vzácné zeminy, tak i vliv technologického postupu na homogenitu skel a vlastnosti připravených vlnovodů.

Stanovení oblasti stability tuhých roztoků v systému **La_{0.55-x}Bi_xSr_{0.45}MnO₃**

Autor: Petr Tomeš
Ročník: 3.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Aleš Strejc

Oxidy obecného vzorce $\text{Ln}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ ($\text{Ln} = \text{Bi}, \text{La}, \text{Y}$, lanthanoidy; $\text{A} =$ alkalické kovy, kovy alkalických zemin) mají strukturu odvozenou od perovskitové struktury CaTiO_3 . Tyto materiály jsou studovány zejména pro své významné elektronické vlastnosti (teplotně závislé přechody kov – izolátor), magnetické vlastnosti (např. teplotně závislé přechody feromagnet – anti feromagnet), ale i pro vlastnosti katalytické. Tato práce se zabývá stanovením oblasti stability tuhých roztoků v systému $\text{La}_{0.55-x}\text{Bi}_x\text{Sr}_{0.45}\text{MnO}_3$, kde koncovými členy této řady jsou oxidy $\text{La}_{0.55}\text{Sr}_{0.45}\text{MnO}_3$, který vykazuje vlastnosti feromagnetického kovu, a $\text{Bi}_{0.55}\text{Sr}_{0.45}\text{MnO}_3$ chovající se jako anti feromagnetický nábojově uspořádaný izolátor. Vzorky byly připravovány klasickým keramickým postupem a jejich fázové složení bylo zkoumáno rentgenovou difrakční analýzou. Znalost mezí stability výše uvedeného systému bude využita jako vstupní informace pro pěstování monokrystalů těchto látek. Jednofázové polykrystalické vzorky budou dále podrobeny transportním a magnetickým měřením.

Využití vysokofrekvenčních reaktivních plazmových technologií **v procesu přípravy skleněných substrátů**

Autor: Jaroslav Prokop
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Doc.Ing. Vratislav Flemr CSc, Ing. Adolf Inneman

Tato práce se zabývá studiem přípravy povrchů skleněných substrátů používaných pro výrobu tenkých reflexních vrstev metodou replikace. Proces přípravy skleněných povrchů se skládá z mytí a následného vysokofrekvenčního reaktivního plazmového čištění. Ve fázi mytí je úkolem optimalizace mycí technologie včetně výběru vhodných prostředků (chem. látek) v této technologii používaných. Proces má vést k dosažení co nejčistších a nejlépe odmaštěných povrchů. Fáze vysokofrekvenčního reaktivního plazmového čištění se zaměřuje na optimalizaci procesu odstraňování zbytkových povrchových nečistot pomocí chemických reakcí v plazmě. Reakce probíhají v upravené vakuové napařovačce ve smíšené Ar-H_2 nebo Ar-N_2 atmosféře a je používáno vysokofrekvenčního zdroje střídavého napětí (17 MHz). Tyto vrstvy prochází dále procesem úprav a v konečné fázi jsou používány k fokusaci především RTG záření vyzařovaného vesmírnými objekty (hvězdami).

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: KOVOVÉ MATERIÁLY

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství, 26.11.2004

Zahájení v 9:00, budova A, chodba ústavu

Komise (ústav 106):

prof. Ing. Pavel Novák, CSc. - předseda

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

doc. Ing. Jitka Jandová, CSc.

Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Ing. Luděk Joska, CSc.

Přihlášeno: 15 účastníků, 14 prací

Lukáš Bláha	<i>Vlastnosti rychle ztuhlých hliníkových slitin</i>
Antonín Doupal	<i>Příprava a vlastnosti vrstev silicidů na slitinách titanu</i>
Tereza Fuksová	<i>Chemická a strukturní nehomogenita litého bronzu (Sousoší Sv. Jiří na Pražském hradu)</i>
Lubomír Havlák	<i>Srážení Li_2CO_3 z odpadních vod po výrobě tekutého kaučuku</i>
Vítězslav Knotek	<i>Vliv složení atmosféry na strukturu a vlastnosti plazmově nitridované PM oceli legované niobem</i>
Petr Maláč	<i>Hydrometalurgické zpracování jarožitů pro přípravu oxidu železa</i>
Alena Michalcová	<i>Rafinační elektrolyza Cu anod se zvýšeným obsahem Sn a Pb</i>
Jakub Mlnářik, Miroslav Zgažar	<i>Příčiny snížené korozní odolnosti korozivzdorných ocelí</i>

Magda Morťaniková	<i>Zvýšení otěruvzdornosti nízkolegované oceli tepelným a chemicko-tepelným zpracováním</i>
Michal Novák	<i>Plazmová nitridace ledeburitických nástrojových ocelí</i>
Aleš Pelikán	<i>Stanovení kvality povlaku výztuže plátované korozivzdornou ocelí</i>
Marek Sobota	<i>Odolnost korozivzdorných ocelí v pórovém roztoku čerstvého betonu</i>
Kryštof Šigut, Václav Bierhanzl	<i>Koroze titanu ve fyziologickém roztoku obsahujícím fluoridové ionty</i>
Miroslav Zgažar, Jakub Mlnářík	<i>Vliv stavu povrchu na růst oxidické vrstvy na korozivzdorné oceli</i>

Vlastnosti rychle ztuhlých hliníkových slitin

Autor: Lukáš Bláha
Ročník: 2.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Rychle ztuhlé hliníkové slitiny mají výhodnější vlastnosti ve srovnání s konvenčními hliníkovými slitinami. Dochází zde k potlačení strukturních nehomogenit, slitiny jsou pevnější, odolnější vyšším teplotám a je možno je vytvrzovat.

Rychle ztuhlé slitiny byly připraveny metodou melt spinning. To znamená, že tavenina byla tryskou vytlačena na rychle rotující kotouč, což vedlo ke vzniku rychle ztuhlých pásků. Byla sledována a porovnávána mikrostruktura rychle ztuhlých slitin Al-Ni₁₇, Al-Ni₁₇-Sr₂, Al-Mn₅ a Al-Mn₅-Sr₂. Pro srovnání byla také sledována mikrostruktura těchto slitin gravitačně odlitých v inertoní Ar atmosféře. Dále byla měřena tvrdost slitin v rychle ztuhlém i pomalu ztuhlém stavu. Fázové složení bylo určováno pomocí RTG difrakce.

Mikrostruktura rychle ztuhlých slitin je tvořena hliníkovou maticí a intermetalickými fázemi, které jsou v ní rozptýleny. Dále jsou z kolmých řezů pásků patrné postupné změny struktury způsobené měnící se ochlazovací rychlostí (vzdáleností od chladícího kotouče). V některých případech byla rychlost ochlazování tak velká, že se intermetalické fáze nestačily vyloučit. Podle očekávání je mikrostruktura pásků daleko jemnější než u běžně odlitých slitin. Z měření tvrdosti plyne, že slitiny s niklem jsou tvrdší než slitiny obsahující mangan.

Příprava a vlastnosti vrstev silicidů na slitinách titanu

Autor: Antonín Doupal
Ročník: 3.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Tomáš Kubatík

Cílem práce bylo zhodnocení povrchových vrstev na titanových slitinách připravených metodou křemíkování z kapalné fáze. Tyto vrstvy se vyznačují dobrou oxidační odolností za vysokých teplot.

Vrstvy byly připraveny reakcí slitin s taveninou AlSi₃₀ za teploty 900°C. Po vyjmutí vzorků byl zbytek ztuhlé taveniny odleptán v HCl. U takto připravených vzorků byla sledována mikrostruktura vrstev, fázové složení vrstev a oxidační odolnost za vysokých teplot. Vzorky byly oxidovány při teplotě 850°C po dobu 96 h. V závislosti na době oxidace byly zaznamenávány hmotnostní přírůstky.

Z výsledků oxidační odolnosti lze říci, že připravené vrstvy účinně chrání proti vysokoteplotní oxidaci. Připravené vrstvy jsou poměrně silné a kompaktní. Očekávat lze rovněž zlepšené abrazivní vlastnosti těchto vrstev.

Chemická a strukturní nehomogenita litého bronzu (Sousoší Sv. Jiří na Pražském hradu)

Autor: Tereza Fuksová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Klasickou optickou mikroskopií a elektronovou mikroskopií s analýzou EDAX byla studována struktura, chemické složení jednotlivých strukturních fází a složení slitiny, z níž bylo před více než šesti sty lety zhotoveno sousoší Sv. Jiří na Pražském hradu. V souladu s dostupnými publikovanými údaji bylo zjištěno, že původní části sousoší jsou odlity z olovnatého bronzu s obsahem okolo 16% olova a malou příměsí cínu, arzenu, antimonu a vizmutu. Makroskopická nehomogenita chemického složení byla zjišťována pomocí mobilního rentgenfluorescenčního spektrometru X-MET 3000 na cca 50 měřících bodech po celém obvodu a výšce podstavce sousoší. Na ostatních partiích sousoší byla prokázána vertikální skoková změna chemického složení bronzu v okolí zřetelných horizontálních linií, vzniklých v průběhu odlévání sousoší při navazování dílčích dávek tekutého kovu z rozdílných taveb. RFX spektrometrem byly analyzovány i lokality opravované při nejrozsáhlejším restaurátorském zásahu v polovině minulého století. Analýza prokázala použití materiálu s výrazně odlišným složením oproti původní slitině, s nižším obsahem olova a vyšším obsahem cínu.

Srážení Li_2CO_3 z odpadních vod po výrobě tekutého kaučuku

Autor: Lubomír Havlák
Ročník: 3.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Ján Kondás

Podmínky srážení Li_2CO_3 z louhových roztoků po výrobě tekutého kaučuku ve firmě Kaučuk a.s., které obsahují 3-6% Li a jsou znečištěny organickými látkami, byly ověřovány na modelových roztocích. Na základě získaných výsledků byla koncentrace Li v odpadních roztocích upravena destilací na cca. 12g Li/l a vysrážen Li_2CO_3 za použití CO_2 .

Vliv složení atmosféry na strukturu a vlastnosti plazmově nitridované PM oceli legované niobem

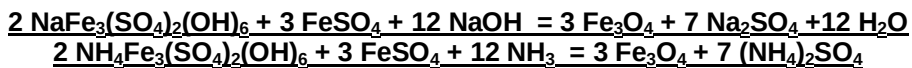
Autor: Vítězslav Knotek
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák

Nitridace se využívá ke zlepšení tvrdosti a kontaktních vlastností povrchu nástrojů a tím i ke zvýšení jejich životnosti. Cílem této práce bylo popsat vliv složení nitridační atmosféry na mikrostrukturu a vlastnosti vrstev na nástrojové oceli obsahující 2,5%C, 3,3%Si, 6,2%Cr, 2,2%Mo, 2,6%V, 2,6%Nb a 1,0%W vyrobené technologií práškové metalurgie. Ocel byla před nitridací zušlechtěna, čímž bylo dosaženo tvrdosti přibližně 750 HV. Pulsní plazmová nitridace byla prováděna při teplotě 500°C a době výdrže 180 min. Bylo použito nitridačních atmosfér o složení $N_2:H_2=1:3$ a $1:6$. Po nitridaci byla studována tvrdost, struktura a fázové složení připravených vrstev v závislosti na složení nitridační atmosféry. Rovněž byla modifikací metody „pin-on-disc“ studována odolnost proti abrazivnímu opotřebení. Měření ukázala, že pro studovanou ocel je vhodnější nitridace v atmosféře $N_2:H_2=1:3$. Bylo zjištěno, že nitridace v prostředí s vyšším obsahem dusíku ($N_2:H_2=1:3$) vede k dosažení větší tloušťky nitridované vrstvy a ke vzniku sloučeninové vrstvy na povrchu. To má za následek vyšší tvrdost a otěruvzdornost než v případě vzorku nitridovaného v atmosféře $N_2:H_2=1:6$.

Hydrometalurgické zpracování jarožitů pro přípravu oxidu železa

Autor: Petr Maláč
Ročník: 3.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Hong Vu, Ph.D.

Jarožité sloučeniny se vznikají při odstraňování Fe ze síranových roztoků. Výhodou tohoto postupu je jeho jednoduchost, vysoká účinnost precipitace, výborná filtrovatelnost jarožitových sráženin, nízká míra koprecipitace jiných kovů do sráženin a nižší spotřeba neutralizačních činidel. Na druhé straně je jarožit klasifikován jako nebezpečný odpad kvůli obsahu těžkých kovů. Hydrotermální konverze jarožitu umožňuje získat oxidy železa, které je možno využít jako surovinu pro výrobu oceli nebo surového železa nebo jako pigmenty. Tato konverze jarožitu v zásaditém prostředí, která je katalyzována přítomností $FeSO_4$ probíhá podle následujících rovnic:



Čistota a mineralogické složení závisí na podmínkách přípravy. Cílem této práce bylo zjistit podmínky převedení odpadního sodného a amonného jarožitu na komerčně využitelné oxidy železa za využití hydrotermální konverze. Během experimentů byl sledován vliv rychlosti přidávků činidel na čistotu, mineralogické složení a velikost částic vznikajících oxidů železa.

Rafinační elektrolýza Cu anod se zvýšeným obsahem Sn a Pb

Autor: Alena Michalcová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Jitka Jandová, CSc.

Cílem práce je nalezení optimálních podmínek rafinační elektrolýzy Cu anod obsahujících Sn, Pb a Ag. Při práci byly použity dva druhy anod s rozdílným obsahem příměsí.

U anody obsahující 0,65%Sn, 0,47%Pb a 5,52%Ag byl zkoumán vliv proudové hustoty na filtrační vlastnosti anodového kalu. Vliv různých flokulantů a maskujících činidel na filtrační vlastnosti anodového kalu, jeho složení a polarizaci anody byl sledován u anody obsahující 19,61%Sn, 16,90%Pb a 0,71%Ag. U těžké anody byla sledována možnost recyklace elektrolytu.

Příčiny snížené korozní odolnosti korozivzdorných ocelí

Autor: Jakub Mlnářík, Miroslav Zgažar
Ročník: 3.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Stoulil, Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

Korozní odolnost legovaných slitin, je podmíněna samovolnou tvorbou stabilní pasivní vrstvy. Její kvalita může být negativně ovlivněna buď během výroby a zpracování nebo i používání korozivzdorné oceli. Při zpracování legovaných ocelí může být negativně ovlivněna korozní odolnost povrchu přímo i nepřímo např. tvorbou sloučenin / minoritních fází (oxidy, karbidy, nitridy atd.) bohatých na Cr. Oblasti ochuzené o chrom mohou mít jednak lokální povahu a jednak se vyskytovat po celém povrchu. Cílem práce bylo ověření vlivu různých zpracování materiálu na korozní vlastnosti. Byly studovány různé případy ovlivnění povrchové vrstvy:

- vnitřní povrch trubek, materiál 1.4401, se sníženou korozní odolností vlivem ulpělých nečistot po mechanickém zpracování;
- změna povahy povrchové vrstvy leskle žíhaných plechů nadusičením povrchu při tepelném zpracování;
- ochuzení o chrom pod vrstvou oxidů vytvořených při teplotě 700 až 900°C;
- ochuzení o chrom vyvolané vakuovým žíháním ocelí.

Zvýšení otěruvzdornosti nízkolegované oceli tepelným a chemicko-tepelným zpracováním

Autor: Magda Morťaniková
Ročník: 4.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák

Cílem práce bylo nalezení optimálního režimu tepelného případně chemicko-tepelného zpracování nízkolegované oceli obsahující 0,78%C, 0,66%Mn, 0,63%W, 0,16%V a 0,18% Si pro aplikaci ve strojírenském průmyslu. Toto zpracování by mělo vést k požadovanému zvýšení tvrdosti a otěruvzdornosti oceli. Na ocel byly aplikovány různé režimy tepelného zpracování, pulsní plazmová nitridace a karbonitridace v solné lázni s následnou oxidací povrchu. Byla hodnocena tvrdost a mikrostruktura pomocí optického metalografického mikroskopu v závislosti na podmínkách zvoleného procesu.

Výchozí struktura studovaného materiálu byla tvořena globulárním perlitem, což ukazuje, že součást byla ve stavu po žíhání na měkko. Po zakalení z teploty 800°C do oleje byla matrice martenzitická s rovnoměrně rozptýlenými karbidy. Tvrdost v kaleném stavu dosahovala hodnoty cca 850 HV1. Popouštěním při teplotě 200°C klesla tvrdost na 740 HV1, popouštěním při 500°C bylo dosaženo tvrdosti 430 HV1. Plazmovou nitridací a karbonitridací v solné lázni byla na povrchu vytvořena rovnoměrná sloučeninová vrstva o tloušťce až 10 µm a tvrdosti cca 1100 HV 0,005.

Plazmová nitridace ledeburitických nástrojových ocelí

Autor: Michal Novák
Ročník: 3.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák

Nástrojová ocel Nb3 legovaná niobem vyrobená technologií práškové metalurgie (PM) je zcela nový experimentálně vyvinutý materiál určený pro práci za studena, proto je nutné porovnat její vlastnosti s běžně dostupnými komerčními ocelmi pro obdobné použití. Pro srovnání struktury a vlastností zkoumané oceli Nb3 v zušlechťeném stavu a po plazmové nitridaci byly použity oceli ČSN 19 573 a 19 830, připravené litím ingotů a následným kováním, a PM ocel VANADIS 6. Pulsní plazmová nitridace všech ocelí byla prováděna při teplotě 500°C a době výdrže 180 min. Bylo použito nitridační atmosféry o složení $N_2:H_2=1:3$. Po nitridaci byla u všech ocelí studována tvrdost, struktura a fázové složení připravených vrstev. Ukázalo se, že legování niobem vede ke zvýšení tvrdosti nitridovaných vrstev. Dále bylo zjištěno, že za zvolených podmínek se sloučeninová vrstva tvoří pouze na povrchu ocelí s vyšším obsahem uhlíku (Nb3, VANADIS 6 a 19 573).

Stanovení kvality povlaku výztuže plátované korozivzdornou ocelí

Autor: Aleš Pelikán

Ročník: 3.

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D., Ing. Martin Bojko

Korozivzdorné oceli se řadí mezi alternativní kovové materiály pro výztuže betonu. Cílem jejich aplikace je snížení nákladů nutných na opravu škod způsobených korozi výztuže z uhlíkové oceli v betonu zkarbonatovaném nebo kontaminovaném chloridy. I přes nespornou výhodnost použití korozivzdorných ocelí z dlouhodobého hlediska je snahou snížit cenu takové výztuže. Řešením je plátování uhlíkové oceli korozivzdornou ocelí. Nutností však je vytvoření souvislého povlaku s dostatečnou tloušťkou a zachování dostatečné korozní odolnosti povlaku. Za podmínek přípravy povlaku a válcování za tepla hrozí zvýšení obsahu uhlíku v povlaku a následné zcitlivění k mezikrystalové korozi. Ochuzení o chrom v povlaku může vést ke snížení odolnosti k napadení chloridy. Cílem bylo stanovit kvalitu povlaku žebírkové výztuže z hlediska tloušťky a rovnoměrnosti vrstvy korozivzdorné oceli a z hlediska náchylnosti k mezikrystalové a bodové korozi expozičními a elektrochemickými zkouškami. Z výsledků vyplývá, že povlak z korozivzdorné oceli je souvislý a dostatečně korozně odolný.

Odolnost korozivzdorných ocelí v pórovém roztoku čerstvého betonu

Autor: Marek Sobota

Ročník: 2.

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D., Ing. Martin Bojko

Koroze ocelové výztuže v betonu způsobuje vážná poškození železobetonových konstrukcí a výrazné zkrácování jejich životnosti. Celosvětově jsou vynakládány obrovské finanční objemy na odstraňování těchto škod a zachování provozuschopnosti konstrukce. Jednou z cest, která vede k dosažení dlouhodobé životnosti bez nutnosti nákladných sanačních zásahů, je používání korozivzdorné oceli jako výztuže betonu. Existuje široké spektrum korozivzdorných ocelí lišících se ve složení a struktuře. Pro použitelnost jednotlivých typů ocelí jako výztuže je nutné znát jejich korozní odolnost v závislosti na obsahu chloridů a na pH pórového roztoku betonu. Cílem bylo stanovit kritické koncentrace chloridů pro aktivaci různých typů korozivzdorných ocelí v závislosti na stavu povrchu, pH pórového roztoku čerstvého betonu a obsahu chloridů. Z výsledků elektrochemických zkoušek vyplývá, že s výjimkou martenzitické oceli FeCr12 je odolnost všech ostatních typů s čistým povrchem neomezená. Zokoujení vede k výraznému poklesu odolnosti i v případě vysokolegovaných typů.

Koroze titanu ve fyziologickém roztoku obsahujícím fluoridové ionty

Autor: Kryštof Šigut, Václav Bierhanzl*
Ročník: 2. ročník, 1. ročník*
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Marcela Poddaná, Ing. Luděk Joska, CSc.

V práci byla studována štěrbinová koroze titanu v prostředí modelujícím fluoridové výplachové roztoky užívané ve stomatologii. Na podstavách válcových vzorků titanu (grade 2) byly po sterilizaci (120°C/20 min) za pomoci PTFE přílozek vytvořeny podmínky pro vznik štěrbinové koroze. Takto připravené modely byly exponovány (120 minut/37°C) ve fyziologickém roztoku (pH neupravené, 4,0; 5,5) s přídavkem fluoridových iontů (maximální koncentrace 5000 ppm). Povrchy byly po expozici fotografovány, úroveň korozního napadení byla hodnocena vizuálně. Na základě výsledků lze konstatovat, že pro zvolený expoziční čas a každou studovanou úroveň pH existuje hraniční koncentrace fluoridových iontů, pod kterou již ke koroznímu napadení nedochází. Výsledky byly srovnány s daty z literatury.

Vliv stavu povrchu na růst oxidické vrstvy na korozivzdorné oceli

Autor: Miroslav Zgažar, Jakub Mlnářik
Ročník: 2.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Stoulil, Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

Vliv stavu povrchu na průběh oxidačních dějů byl sledován u austenitické korozivzdorné oceli exponované na vzduchu teplotám 700 až 900°C po dobu až 10h. Ocel byla použita s různě upraveným povrchem mořením a po kontaminaci chloridy. Průběh oxidačního děje byl sledován pomocí hmotnostních změn vzorků. Oxidy byly s povrchu odstraňovány klasickým mořícím postupem ($\text{HNO}_3 + \text{HF}$) a redukcí v bezvodém roztoku LiCl (bez ataku povrchu oceli, přiléhajícího k oxidické vrstvě). Bylo zjištěno, že kontaminace povrchu chloridy vede ke vzniku oxidické vrstvy špatně lpící na povrchu. Pro průběh oxidace při jednotlivých teploty byly navrženy kinetické rovnice.

Studentská vědecká konference 2004

Sekce:CHEMIE A TECHNOLOGIE POLYMERŮ

Ústav polymerů, 26.11.2004

Zahájení v 9:00, budova B, posluchárna B 11

Komise (ústav 112)

Doc. Ing. Vladimír Maroušek, CSc. - předseda

Doc.Ing. I.Prokopová, CSc. - místopředseda

Ing. Jan Budín - organizační tajemník

Doc.Ing.Petr Hron, CSc.

Doc.Ing.A.Kuta, CSc.

Přihlášeno: 8 účastníků

Veronika Dočkalová	<i>Vlastnosti a morfologie směsí PA 12 / PVC</i>
Kateřina Jílková	<i>Příprava a vlastnosti kompozitů silikonová pryž – hydroxyapatit – hydrogel</i>
Libor Kostka	<i>Poly[(ε-kaprolaktam)-co-(δ-valerolakton)] – příprava a charakterizace</i>
Miroslav Koudela	<i>Cyklické oligomery laktamů a jejich vlastnosti</i>
Edita Landová	<i>Nízkoteplotní vulkanizace SBR modifikovaného kapalným polybutadienem</i>
Jaroslav Myšák	<i>Vliv titanové běloby na stabilitu PVC</i>
Pavla Niklová	<i>Studium biodegradace aromaticko-alifatických kopolyesterů</i>
Jana Svobodová	<i>Polyesteramidové nanokompozity</i>

Vlastnosti a morfologie směsí PA 12 / PVC

Autor: Veronika Dočkalová
Ročník: 4
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Ing. Jan Šimek, CSc.

Směsi PA 12 a PVC byly připraveny mícháním v tavenině v komůrce hnětiče Brabender. Vzorky byly studovány skenovací elektronovou mikroskopií (SEM), dynamicko-mechanickou analýzou (DMA), diferenciální skenovací kalorimetrií (DSC) a byla zkoumána vrubová houževnatost (Charpy).

Směsi PA 12 / PVC byly kompatibilizovány chlorovaným PE během mísení v tavenině. Bylo zjištěno, že binární směsi PVC / PA 12 jsou heterogenní, nemísitelné a vykazují dvoufázovou strukturu. Přídavkem chlorovaného PE lze zvýšit vrubovou houževnatost směsí.

Příprava a vlastnosti kompozitů silikonová pryž - hydroxyapatit – hydrogel

Autor: Kateřina Jílková
Ročník: IV.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Petr Hron, CSc.

Biomateriály, používané jako implantáty v humánní medicíně, nesmí vyvolávat nepříznivou odezvu organismu. V ideálních případech dojde buď k opouzdření implantátu fibrinovým pouzdrům, nebo ke spojení mezi implantátem a hostitelskou tkání. Materiály používané pro implantace musí projít řadou testů. Mezi základní testy in vitro, hodnotící bioaktivitu implantátů, patří sledování interakcí materiálu se simulovanou tělní tekutinou (SBF), která má stejnou koncentraci iontů, jako lidská krevní plazma. Pokud se na povrchu materiálu v kontaktu s SBF vytvoří hydroxykarbonátový apatit (HCA), může být materiál považován za bioaktivní.

Předkládaná práce si klade za cíl, připravit kompozitní materiály na bázi silikonové pryže a hodnotit tvorbu HCA na jejich povrchu. Bioaktivní charakter silikonové pryže je dán použitím vysoce bioaktivního materiálu - hydroxyapatitu jako plniva. V práci je použit hydroxylapatit, jehož povrch byl modifikován organofunkčními silany, za účelem zlepšení průběhu adiční vulkanizace silikonové pryže. Hydrogel na bázi řídce sesíťovaného poly(akrylamidu) je další složkou kompozitu, zvyšující jeho hydrofilní charakter.

Poly[(ϵ -kaprolaktam)-co-(δ -valerolaktan)] – příprava a charakterizace

Autor: Libor Kostka
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Ing. Jiří Brožek, CSc., Ing. Daniela Chromcová

Aniontovou kopolymerací laktamu s laktony lze připravit polyesteramidy (PEA). S ϵ -kaprolaktonem (CLO), resp. s poly(ϵ -kaprolaktonem) (PCLO), lze připravit celou škálu polyesteramidů (PEA) ve vysokých výtěžcích. Mechanické, fyzikálně chemické vlastnosti a citlivost k biodegradaci závisí na obsahu CLO jednotek v kopolymeru. Zaměníme-li CLO za δ -valerolaktan (VLO), resp. poly(δ -valerolaktan) (PVLO), pak lze připravit PEA s obsahem VLO jednotek do 20%. Cílem práce bylo studium aniontové polymerace CLA v přítomnosti PVLO a přispět tak k objasnění rozdílů v polymerační aktivitě VLO a CLO, resp. odpovídajících polyesterů. Vlastní polymerace CLA iniciovaná etylmagnesiumbromidem byla studována v teplotním intervalu 150-210°C, pro 3 a 5hm% PVLO. Průběh polymerace byl hodnocen stanovením vážkové konverze a viskozitně-průměrného polymeračního stupně. Obsah zabudovaných strukturních jednotek VLO v PEA byl vyhodnocen pomocí ^{13}C NMR a elementární analýzy a korelován s výsledky stanovení teploty tání kopolymeru (DSC).

Cyklické oligomery laktamů a jejich vlastnosti

Autor: Miroslav Koudela
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Cyklické oligomery jsou nejdůležitějšími vedlejšími produkty polymerizace laktamů. Způsob jejich vzniku v průběhu polymerace závisí na reakčním mechanismu, a tedy i na použitém iniciátoru polymerizace. Rovnovážný obsah cyklických oligomerů výrazně závisí na velikosti cyklu výchozího laktamu.

Struktura a vlastnosti cyklických oligomerů hexano-6-laktamu (6-HL) a oktano-8-laktamu (8-OL) byly již dříve studovány. Dosud však chyběly informace o struktuře cyklického dimeru dodekano-12-laktamu (12-DL).

Cyklický dimer byl izolován z produktů katalytické depolymerace polyamidu 12 a byl identifikován pomocí metod hmotnostní spektrometrie a HPLC. Jeho termické chování bylo porovnáváno s homology odvozenými od 6-HL a 8-OL pomocí DSC.

Izolace čistého cyklického dimeru 12-DL a charakterizace jeho vlastností může mít i praktický význam. Je to důležitý standard pro kvantitativní analýzu nízkomolekulárních produktů polymerizace 12-DL.

Nízkoteplotní vulkanizace SBR modifikovaného kapalným polybutadienem

Autor : Edita Landová
Ročník : V.
Ústav : Ústav polymerů
Školitel : Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.
Konzultant : Ing. Zdeněk Hrdlička

Kapalný polybutadien bez koncových funkčních skupin, vyráběný v a.s. KAUČUK Kralupy nad Vltavou v České republice pod obchodním názvem KRASOL LB (LB), byl použit jako modifikátor směsí z butadienstyrenového kaučuku. Podle dřívějšího výzkumu LB usnadňuje zpracování tím, že snižuje energii spotřebovanou na zamíchání kaučuku s plnivem a snižuje viskozitu kaučukové směsi. Lze tak dosáhnout snadného tváření i za teplot nižších než 100 °C. Použití dostatečně rychlého urychlovače umožní i následnou sirnou vulkanizaci za těchto teplot, což vše vede k energetickým úsporám.

V práci je věnována pozornost výběru vhodného urychlovače vulkanizace. Karbamáty a xantháty, jinak účinné v přírodním kaučuku, v SBR selhaly. Proto byl použit bezsírový systém s kombinací tetramethylthiuramdisulfidu a thiomočoviny.

Přítomnost LB ve směsi snižuje rychlost vulkanizace, nemá však vliv na velikost aktivační energie vulkanizace. Vulkanizáty byly extrahovány toluenem, cyklohexanem a heptanem, přičemž obsah LB vázaného v síti vulkanizátu byl 25 - 35 hmot. %.

Vliv titanové běloby na stabilitu PVC

Autor: Jaroslav Myšák
Ročník: V.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

K pigmentaci výrobků z PVC je ve funkci bílého anorganického pigmentu využívána nejčastěji titanová běloba. Chemicky je tvořena především TiO_2 , jehož fyzikální a chemické vlastnosti zajistí pigmentu vynikající kryvost a bělost. Mimo to je TiO_2 schopen absorbovat UV záření a zabránit tak destrukci polymerní matrice účinkem slunečního záření. Důsledkem UV absorpce je však i fotochemická aktivita oxidu, který tak může katalyzovat degradaci polymerního řetězce a omezit odolnost směsí PVC světlu a teple. Míra fotoaktivity oxidu je dána především strukturální modifikací a povrchovým pokrytím.

V příspěvku je sledován vliv přítomnosti titanové běloby (povrchově upravený a neupravený typ) na světelnou a tepelnou stabilitu tvrdých a měkčených nestabilizovaných směsí PVC. Směsi ve formě folií byly vystaveny tepelnému namáhání při teplotě 180°C, UV záření s dominantní vlnovou délkou 360, resp. 254 nm, a byly hodnoceny z hlediska vývoje barevných změn a zbytkové tepelné stability.

..

Studium biodegradace aromaticko-alifatických kopolyesterů

Autor: Pavla Niklová

Ročník: V.

Ústav: Ústav polymerů

Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc., Ing. Jiří Vitásek

Polyethyltereftalát (PETP) je díky svým výborným mechanickým i termickým vlastnostem hojně využíván v obalové technice, zejména pro výrobu nápojových lahví. S nárůstem spotřeby těchto obalovin narůstá i problém s PETP odpadem. Dosud většina tohoto odpadu končí na skládkách. Jednou z možností využití odpadního PETP je vedle zatím běžnější fyzikální recyklace jeho chemické zpracování.

Byly připraveny aromaticko-alifatické kopolyestery na bázi odpadního PETP a ϵ -kaprolaktonu a testována jejich odolnost k biodegradaci. Vzorky kopolyesteru byly podrobeny kompostovacímu testu (6 týdnů a 6 měsíců) a testu abiotické hydrolýzy. Změny v molekulové struktuře testovaných vzorků v porovnání s původními kopolymerem byly sledovány pomocí viskozimetrických měření roztoků vzorků, dále pomocí GPC a NMR spektroskopie. Výsledky analýz ukazují, že za podmínek abiotické hydrolýzy i kompostovacího testu dochází k degradaci makromolekul kopolyesterů, zatímco molekulová struktura samotného PETP zůstává beze změny.

Polyesteramidové nanokompozity

Autor: Jana Svobodová

Ročník: 4.

Ústav: Ústav polymerů

Školitel: Ing. Jiří Brožek, CSc., Ing. Jana Kredatusová

Aniontovou kopolymerizací ϵ -kaprolaktamu (CLA) a ϵ -kaprolaktonu (CLO) lze v závislosti na složení polymerační náslady připravit pestrou paletu materiálů – polyesteramidů (PEA). Zavedením CLO jednotek do struktury polyamidového řetězce se zvyšuje citlivost k biologické rozložitelnosti. S rostoucím obsahem CLO jednotek se snižuje teplota tání, teplota skelného přechodu a obsah krystalické fáze, markantněji se také zhoršují mechanické vlastnosti PEA. U jejich nanokompozitů by bylo možné mechanické vlastnosti zlepšit již při nízké koncentraci nanoplňiva.

Pro přípravu polyesteramidových nanokompozitů bylo využito tzv. exfoliované adsorpce, neboť PEA lze na rozdíl od polyamidů rozpustit v těkavých rozpouštědlech. Byly připraveny nanokompozity s obsahem CLO jednotek 20-100% ve formě folií. Jako plnivo byly použity dva typy organofilizovaného montmorillonitu v koncentraci 5 hm%. Stupeň exfoliace plniva byl hodnocen pomocí WAXS. Nanokompozity byly dále charakterizovány pomocí termických metod TGA a DSC.