

Studentská vědecká konference 2003

Sekce: CHEMIE A TECHNOLOGIE POLYMERŮ

Ústav polymerů, 21.11.2003

Zahájení v 9:00 hodin, budova B, místnost B11

Komise (ústav 112):

Doc. Ing. V. Maroušek, CSc. – předseda

Doc. I. Prokopová, CSc. - místopředseda

Ing. Petr Hron, CSc.

Ing. Z. Vymazalová, CSc.

Ing. J. Budín - organizační tajemník

Přihlášeno: 9 účastníků

Lucie Baslerová

Zuzana Kadlecová

Libor Kostka

Jana Kredatusová

Bronislava Malátková

Jaroslav Myšák

Václav Peer

Jan Tolar

Jaromír Vája

Biologická rozložitelnost polyesteramidů

Autor: Lucie Baslerová
Ročník: V.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Ing. Daniela Chromcová, Ing. Jiří Brožek, CSc.

Polyesteramidy představují skupinu polymerních materiálů se širokým spektrem fyzikálně– chemických vlastností díky variacím typu a zastoupení esterové a amidové složky v polymerních řetězcích. Právě strukturou lze citlivě regulovat jejich biodegradaci. V práci byla studována rozložitelnost polyesteramidů - poly[(ϵ -kaprolaktam)-co-(δ -valerolaktonu)] a poly[(ϵ -kaprolaktam)-co-(ϵ -kaprolaktonu)]. K testu biodegradace bylo využito kompostovacího testu. Změny ve struktuře makromolekul po provedeném testu byly sledovány pomocí termických metod (DSC) a zastoupením laktamových a laktonových jednotek z elementární analýzy. Změna molární hmotnosti byla vyhodnocena z viskozimetrických měření. Biodegradace byla též prokázána TEM mikroskopií, kdy byly pozorovány výrazné změny povrchů vzorků.

Kompozity poly(ϵ -kaprolaktam) – vrstevnaté silikáty

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

Polyamidy jsou nejen důležité vláknotvorné materiály, ale také výborné konstrukční plasty. Pro řadu aplikací se jejich vlastnosti dále modifikují. Komerčně jsou dostupné různé typy polyamidů s rozmanitými fyzikálně-chemickými a mechanickými vlastnostmi. Jednou z možností modifikace je tvorba nanokompozitů s vrstevnatými silikáty. Nanokompozity lze připravit hydrolytickou polymerací ϵ - kaprolaktamu v přítomnosti vhodně modifikovaného montmorillonitu (MMT), ale častěji je v literatuře věnována pozornost míšení v tavenině.

Byla studována příprava (nano)kompozitů aniontovou polymerací ϵ -kaprolaktamu v přítomnosti modifikovaných MMT. Modifikace MMT spočívala ve výměně mezivrstevných sodných kationtů za hořečnaté či vápenaté. Byly připraveny materiály s obsahem do 5 hmot.% modifikovaného MMT ve formě desek, za kterých byla připravena tělíska pro hodnocení mechanických vlastností. K charakterizaci (nano)kompozitů bylo dále využito termických metod - TGA a DSC.

Polymerace ϵ -kaprolaktamu v přítomnosti poly(δ -valerolaktonu)

Autor: Libor Kostka

Ročník: IV.

Ústav: Ústav polymerů

Školitel: Ing. Jiří Brožek, CSc., Ing. Daniela Chromcová

Kopolymerací ϵ -kaprolaktamu (CL) s laktony lze připravit polyesteramidy. S ϵ -kaprolaktonem (CLO), resp. s poly(ϵ -kaprolaktonem) (PCLO), lze připravit celou škálu polyesteramidů ve vysokých výtěžcích s dobrými mechanickými a fyzikálně-chemickými vlastnostmi v závislosti na obsahu CLO jednotek v kopolymeru. Zaměníme-li CLO za δ -valerolakton (VLO) resp. poly(δ -valerolakton) (PVLO), lze připravit polyesteramidy s obsahem VLO jednotek pouze do 15 hm%.

Cílem práce bylo studium aniontové polymerace CL v přítomnosti PVLO a přispět tak k objasnění rozdílů v polymerační aktivitě VLO a CLO, resp. odpovídajících polyesterů. PVLO byl připraven polymerací VLO iniciovanou EtMgBr. Vlastní polymerace CL byla iniciovaná EtMgBr a studována v teplotním intervalu 150-210°C. Průběh polymerace byl hodnocen stanovením vážkové konverze a viskozitně průměrného polymeračního stupně. Získané výsledky byly porovnány s obdobnou polymerací CL v přítomnosti PCLO.

Aniontová polymerace ϵ -kaprolaktamu iniciovaná sloučeninami vápníku

Autor: Jana Kredatusová

Ročník: V.

Ústav: Ústav polymerů

Školitel: Ing. Jiří Brožek, CSc.

Aniontová polymerace ϵ -kaprolaktamu (CL) je ve většině případů iniciovaná sodnou solí ϵ -kaprolaktamu. U RIM technologií se využívá k iniciaci polymerace Grignardova sloučenina - ϵ -kaprolaktam-magnesiumbromid (CLMgBr).

Volba typu iniciátoru má zásadní vliv na průběh polymeračního procesu, ovlivňuje např. obsah nízkomolekulárních produktů (cyklických oligomerů) a termickou stabilitu. Malá pozornost je v literatuře věnovaná iniciátorům na bázi vápníku – di(ϵ -kaprolaktamátu) vápenatému (CL₂Ca).

Cílem této práce bylo otestovat polymerační aktivitu CL₂Ca pomocí tzv. neaktivované polymerace. Rychlost polymerace byla hodnocena na základě časové závislosti obsahu polymeru. Dále byl stanoven početně průměrný polymerační stupeň a vypočteny rychlostní konstanty polymerace, které byly porovnány s obdobnou polymerací iniciovanou di(ϵ -kaprolaktamátem) hořečnatým. U vybraných vzorků byl HPLC analýzou extraktů stanoven obsah cyklických oligomerů v polymerizátu. Byla též testována polymerační aktivita ϵ -kaprolaktamkalciumbromidu připraveného *in situ* disproportionační reakcí CL₂Ca a CaBr₂.

Biologická degradace aromaticko–alifatických kopolyesterů I. **Molekulová struktura kopolyesterů**

Autor: Bronislava Malátková
Ročník: V.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Byla studována biologická degradace chemicky modifikovaného polyethyltereftalátu (PETP) z použitých nápojových lahví. Aromaticko–alifatické kopolyestery se strukturními jednotkami ethyltereftalátu a kyseliny mléčné nebo ethyltereftalátu a ethylenadipátu byly biologicky degrado-vány dvěma postupy; jednak kompostovacím testem a jednak vlivem působení 6 kmenů ligninolytických hub. Fólie testovaných kopolyesterů byly po 74 denním uložení v kompostu charakterizovány hmotnostním úbytkem a změnou redukované viskozity jejich kresolových roztoků v porovnání s původními vzorky. Vyhodnocení biologické rozložitelnosti kopolyesterů vlivem ligninolytických hub byla komplikována jejich metabolickými produkty, nerozpustnými v široké škále použitých rozpouštědel. Jedná se pravděpodobně o polysacharidy s větvenou nebo sesíťovanou strukturou.

Výsledky měření fólií testovaných kopolyesterů, stejně jako snímky jejich povrchů získaných pomocí SEM prokazují, že největší citlivost k degradaci mají aromaticko–alifatické kopolyestery se strukturními jednotkami kyseliny mléčné.

Tepelná stabilizace PVC

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

Nezbytnou součástí systému umožňujícího zpracování PVC jsou tepelné stabilizátory. Zajišťují snížení rychlosti dehydrochlorace a uchování původní barvy směsi. S cílem omezit, popřípadě eliminovat používání stabilizátorů s obsahem těžkých kovů zejména olova, jsou hledány nové stabilizační systémy na bázi ekologicky přijatelných sloučenin.

Práce je příspěvkem ke studiu působení tribazického síranu olovnatého, syntetického hydrotalcitu, resp. kyseliny stearové ve směsích PVC v průběhu jejich tepelného namáhání. Tyto sloučeniny samy o sobě vykazují malý (tribazický síran), žádný, resp. negativní vliv na stabilitu směsí PVC. Jejich kombinací však lze získat účinný stabilizační systém.

Příprava kompozitních materiálů silikonová pryž-hydrogel

Autor: Václav Peer
Ročník: IV.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Ing. Petr Hron, CSc.

Silikonová pryž je biologicky inertní, což ji předurčuje pro medicínální použití, například jako materiál pro implantáty v humánní medicíně. Nevýhodou je její hydrofobita, která může vyvolávat při kardiovaskulárních aplikacích tvorbu krevních sraženin. Tuto vlastnost je možno omezit hydrofilizací, kterou lze provádět řadou metod. Jedním ze způsobů je možnost hydrofilizovat pryž srážecí polymerací a současným síťováním derivátů kyseliny akrylové a methakrylové ve zbotnalé síti silikonové pryže.

V této práci bylo k botnání použito směsi toluen-kyselina methakrylová.

Cílem práce je ověření možnosti sledování složení směsi během botnání metodami plynové chromatografie, refraktometrie a zjištění teplotní závislosti stupně nabotnění vzorků. Botnání bylo sledováno vážkově a také objemově metodou dvojího vážení.

Biologická degradace aromaticko-alifatických kopolyesterů II. Termické a mechanické vlastnosti kopolyesterů

Autor: Jan Tolar
Ročník: V.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Se stoupající spotřebou polyethyltereftalátu (PETP) v posledních letech se zintenzivňují snahy o recyklaci odpadního PETP. Jednou z možností, zatím méně využívanou, je chemická recyklace. Ve většině případů se glykolýzou, methanolýzou nebo hydrolýzou získávají suroviny pro výrobu nového PETP. Produktů glykolýzy se využívá také pro výrobu polyurethanů.

Reesterifikací PETP z použitých nápojových lahví kyselinou mléčnou a následnou polykondenzací, případně glykolýzou PETP a následnou polykondenzací produktů glykolýzy s kyselinou adipovou nebo sebakovou, byla připravena řada aromaticko-alifatických kopolyesterů. Fólie z těchto kopolyesterů byly kompostovány. Vliv biologického prostředí na povrch fólií zřetelně ukazují snímky pořízené pomocí skenovacího elektronového mikroskopu. U testovaných kopolyesterů byla stanovena pevnost v tahu. Termické chování degradovaných kopolyesterů bylo sledováno metodou DSC.

Možnosti dlouhodobého skladování telechelického polybutadienu

Autor: Jaromír Vája
Ročník: V.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Prof. Ing. Jan Roda, CSc.

Poly(ϵ -kaprolaktam) je široce průmyslově užívaný konstrukční plast. Pro rozšíření oblastí jeho aplikací se modifikuje speciálním, na míru připraveným telechelickým polybutadienem (Kaučuk Kralupy a.s.) označovaným jako makroaktivátor. Výsledkem modifikace je kopolymer poly(ϵ -kaprolaktam)-*blok*-polybutadien, kde polybutadienové domény výrazně zlepšují houževnatost výsledného materiálu.

Pro případnou aplikaci resp. průmyslovou přípravu je nezbytné posoudit stárnutí i možnosti dlouhodobého skladování makroaktivátoru. Možné změny jeho vlastností by se totiž mohly odrazit i na vlastnostech modifikovaného poly(ϵ -kaprolaktamu).

V rámci studie byly ve spolupráci s firmou Kaučuk Kralupy a. s. u tří vybraných vzorků makroaktivátorů posouzeny viskozity a průměrné molární hmotnosti (M_n , M_w). Dále byly sledovány fyzikální a mechanické vlastnosti modifikovaných poly(ϵ -kaprolaktamů) připravených polymeračním odléváním ϵ -kaprolaktamu v přítomnosti makroaktivátoru. Získané hodnoty byly porovnány s hodnotami naměřenými u stejných materiálů v předchozích pěti letech.

Studentská vědecká konference 2003

Sekce: ANORGANICKÁ CHEMIE

Ústav anorganické chemie, 21.11.2003

Zahájení v 9:00 hodin (A210), budova A, chodba před sekretariátem ústavu

Komise (ústav 101):

Předseda: Doc. Ing. Dagmar Sýkorová, CSc.

Členové: Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Ing. Libor Mastný, CSc.

Ing. Pavlína Třešňáková, Ph.D.

Ing. Aleš Strejc

Přihlášeno: 6 účastníků

Vilém Bartůněk (Doc. Ing. Olga Smrčková, CSc.)

Ondřej Bučina (Doc. Ing. Miloš Nevřiva, DrSc.)

Petra Čermáková (Ing. Zlatko Šrank, CSc.)

Stanislava Janáková (Ing. Linda Salavcová)

Eduard Michna (Doc. Ing. Dagmar Sýkorová, CSc.)

Blanka Švecová (Ing. Linda Salavcová)

Modifikace vlastností supravodiče Bi(Pb)-Sr-Ca-Cu-O **substitucí Mn za Cu**

Autor: Vilém Bartůněk
Ročník: 5.
Ústav: anorganické chemie
Školitel: Doc. Ing. Olga Smrčková, CSc.

Vlastnosti vysokoteplotních supravodičů Bi(Pb)-Sr-Ca-Cu-O lze modifikovat změnami složení fáze 2223, a to substitucí části obsahu přítomných prvků nebo dopováním atomy dalších prvků.

Cílem práce bylo zjistit, jakým způsobem se změní elektrické a magnetické vlastnosti supravodivé fáze 2223 (elektrická vodivost, magnetická susceptibilita a kritická proudová hustota) při částečné substituci manganu za měď. Vzorky byly zpracovávány standardním technologickým postupem z oxidů a uhličitánů příslušných prvků tak, aby po dvou kalcinacích a slinování, za teploty 840°C po dobu 168 hodin, teoreticky vznikla fáze o složení $\text{Bi}_{3,2}\text{Pb}_{0,8}\text{Sr}_4\text{Ca}_5\text{Mn}_y\text{Cu}_{(7-y)}\text{O}_x$, kde $y=0,2;0,3;0,4$.

Připravené vzorky byly analyzovány pomocí RTG fázové analýzy a byly charakterizovány teplotními změnami elektrických a magnetických vlastností, při ochlazování na teplotu kapalného dusíku.

Příprava tenkých vrstev metodou MOCVD

Autor: Ondřej Bučina
Ročník: 4.
Ústav: anorganické chemie
Školitel: Doc. Ing. Miloš Nevřiva, DrSc.

K přípravě tenkých vrstev anorganických materiálů depozicí z plynné fáze se využívají jak fyzikální tak chemické postupy. Mezi postupy PVD (Physical Vapour Deposition) patří např. katodové naprašování či molekulární epitaxe. Nevýhodou této metody je především požadavek vysokého vakua (10^{-3} - 10^{-7} Pa) v depoziční komoře a omezená velikost podložky. Tyto problémy můžeme minimalizovat použitím postupu přípravy tenkých vrstev označovaném jako CVD (Chemical Vapour Deposition). Díky široké škále výchozích látek v podobě ať již organických nebo anorganických sloučenin lze v současné době připravit materiály prakticky všech prvků. Metody CVD, které využívají organokovové komplexy jako výchozí látky, označujeme jako MOCVD (Metal Organic Chemical Vapour Deposition).

Úkolem této práce je stanovení vhodných experimentálních podmínek depozice tenkých vrstev metodou MOCVD pro systémy Bi-Sr-Mn-O a Bi-Ca-Mn-O.

Materiál na bázi fosforečnanu hlinitého a TiO₂

Autor: Petra Čermáková
Ročník: 3.
Ústav: anorganické chemie
Školitel: Ing. Zlatko Šrank, CSc., Ing. Libor Mastný, CSc.

Práce se týká studie vlivu složení a tepelného zpracování materiálů na bázi fosforečnanu hlinitého a oxidu titaničitýho na jeho fotokatalytické vlastnosti. V předloženém příspěvku jsou prezentovány výsledky úvodní laboratorní studie přípravy a hodnocení vybraných vlastností sledovaných materiálů získané za období září až listopad 2003.

V rámci experimentální části byly připraveny tři základní matrice lišící se poměrem fosforečnanových a titanylových iontů při konstantním poměru fosforečnanových a hlinitých iontů. Z každé matrice byly připraveny při čtyřech různých teplotách vzorky za účelem zjištění vlivu složení vstupní suroviny a teploty jejího zpracování na složení a fotokatalytické vlastnosti konečného produktu.

Fázové složení připravených vzorků bylo studováno metodou XRD a jejich fotokatalytické účinky byly posouzeny na základě změny optických parametrů tenkého filmu studovaného materiálu, vybarveného bromfenolovou modří, v průběhu jeho expozice UV zdrojem o dominantní vlnové délce 360 nm.

Studium přípravy a vlastností Ag⁺ planárních optických vlnovodů ve sklech obsahujících Er³⁺ ionty

Autor: Stanislava Janáková
Ročník: 3.
Ústav: anorganické chemie
Školitel: Ing. Linda Salavcová

Materiály obsahující ionty některých přechodných prvků jsou v současné době studovány za účelem přípravy aktivních optických struktur, které mohou sloužit také jako optické zesilovače nebo vlnovodné lasery. Pro takovou aktivní funkci vlnovodu se v současné době využívá především emise iontu Er³⁺, obsaženého v tomto případě ve skleněných podložkách, při 1.5 μm.

Tématem této studie byla příprava vlnovodů v nových speciálně formulovaných sklech iontovou výměnou Ag⁺ ↔ Na⁺. Skla připravená s přídavkem oxidu erbitého byla nařezána a naleštěna na optickou kvalitu. Takto připravené substráty byly po důkladném očištění v 2-propanolu ponořeny do reakční taveniny (280 °C) eutektické směsi dusičnanu draselného a sodného s přídavkem dusičnanu stříbrného, ve které probíhala iontová výměna. Vlnovodné vlastnosti vzorků připravených po různě dlouhých dobách iontové výměny byly měřeny vidovou spektroskopií při 671 nm a vyhodnoceny programem PLANPROF. Složení a hloubka připravených optických vrstev byly měřeny metodou SEM a pomocí polarizačního optického mikroskopu. Speciální pozornost byla věnována možnému vymývání erbia z povrchové vrstvy skla, případně změnám v jeho distribuci. Výsledky experimentů byly porovnány s výsledky získanými iontovou výměnou K⁺ ↔ Na⁺ ve stejných typech substrátů a diskutovány především z hlediska jejich potenciálního využití v aktivních vlnovodných strukturách.

Vlastnosti supravodičů Bi – Sr – Ca – Cu – O s oxidy přechodných kovů

Autor: Eduard Michna
Ročník: 5.
Ústav: anorganické chemie
Školitel: Doc. Ing. Dagmar Sýkorová, CSc.

Po objevu fenoménu vysokoteplotní supravodivosti v oxidové keramice nastal hon za přípravou látek s nejvyšší kritickou teplotou T_C a nejvyšší proudovou hustotou J_C . Výzkum ukázal, že vlastnosti supravodivé keramiky jsou ovlivněny přítomností vysokoteplotní supravodivé fáze $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ (fáze 2223, $T_C = 110\text{K}$) ve výsledném vzorku. Přítomnost a množství fáze 2223 se dá ovlivnit jednak postupem přípravy a jednak částečnou substitucí nebo dopováním základní oxidové matrice atomy dalších prvků.

Cílem práce bylo zjistit, zda částečná substituce vápníku vanadem povede ke zvýšení obsahu vysokoteplotní fáze 2223. Vanad byl vnášen do vzorku ve formě V_2O_5 , a to ve stechiometrii $\text{Bi}_{3,2}\text{Pb}_{0,8}\text{Sr}_4\text{Ca}_{5-x}\text{Cu}_7\text{V}_y\text{O}_x$, kde $y=0,2; 0,4; 0,6$. Připravené vzorky byly charakterizovány měřením teplotních závislostí odporu a kritické proudové hustoty. Následně byl určen poměr vzniklých fází RTG analýzou.

Studium přípravy a vlastností K^+ planárních optických vlnovodů ve sklech obsahujících Er^{3+} ionty

Autor: Blanka Švecová
Ročník: 3.
Ústav: anorganické chemie
Školitel: Ing. Linda Salavcová

Materiály obsahující ionty některých přechodných prvků jsou v současné době studovány za účelem přípravy aktivních optických struktur, které mohou sloužit také jako optické zesilovače nebo vlnovodné lasery. Pro takovou aktivní funkci vlnovodu se v současné době využívá především emise iontu Er^{3+} , obsaženého v tomto případě ve skleněných podložkách, při $1,5\ \mu\text{m}$.

Tématem této studie byla příprava vlnovodů v nových speciálně formulovaných sklech iontovou výměnou $\text{K}^+ \leftrightarrow \text{Na}^+$. Skla připravená s přídavkem oxidu erbitého byla nařezána a naleštěna na optickou kvalitu. Takto připravené substráty byly po důkladném očištění v 2-propanolu ponořeny do reakční taveniny ($375\ ^\circ\text{C}$) dusičnanu draselného, ve které probíhala iontová výměna. Vlnovodné vlastnosti vzorků připravených po různě dlouhých dobách iontové výměny byly měřeny vidovou spektroskopií při $671\ \text{nm}$ a vyhodnoceny programem PLANPROF. Složení a hloubka připravených optických vrstev byly měřeny metodou SEM a pomocí polarizačního optického mikroskopu. Speciální pozornost byla věnována možnému vymývání erbia z povrchové vrstvy skla, případně změnám v jeho distribuci. Výsledky experimentů byly porovnány s výsledky získanými iontovou výměnou $\text{Ag}^+ \leftrightarrow \text{Na}^+$ ve stejných typech substrátů a diskutovány především z hlediska jejich potenciálního využití v aktivních vlnovodných strukturách.

Studentská vědecká konference 2003

Sekce: ANORGANICKÉ NEKOVOVÉ MATERIÁLY I

Ústav skla a keramiky FCHT VŠCHT Praha, 21.11.2003

Zahájení v 9:00 hodin, posluchárna A02

Účastníci:

Tomáš Jílek:	Vliv agresivního prostředí na vlastnosti geopolymérů na bázi alkalicky aktivovaných popílků
Eva Kotulánová:	Mikroskopická charakterizace anizometrických částic a reologie jejich suspenzí
Hana Kymlová:	Vliv složení skla na poměr Fe^{II} / Fe^{III} studovaný UV-VIS-IČ spektroskopii
Daniela Podloucká:	Koroze skelných vláken ve fyziologickém prostředí
Anna Svobodová:	Studium rozpustnosti a změn povrchu trikalciumfosfátu působením vodných roztoků
Lucie Štěpánková:	Systém analýzy cementářského slínku
Ivana Zedníková:	Studium koloidní reologie vodných suspenzí práškových směsí na bázi ZrO_2

Komise

předseda:

Prof.Ing. Josef Matoušek, DrSc.

tajemník:

Ing. Eva Gregorová, CSc.

členové:

Doc.Ing. Václav Hulínský, CSc.

Ing. Antonín Lisý, CSc.

Doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

Program:

8:45	vyvěšení posterů		
9:00	zahájení (posluchárna A02)		
9:15	představení u posterů (prostory Ústavu skla a keramiky - 5 minut na jednu práci)		
10:00	diskuse u posterů		
11:00	zasedání komisí		
11:45	vyhlášení	výsledků	(posluchárna A02)

Vliv agresivního prostředí na vlastnosti geopolymérů na bázi alkalicky aktivovaných popílků

Autor: Tomáš Jílek

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: Doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

Při působení alkalických látek jako NaOH, Na₂CO₃ nebo Na₂SiO₃ na hydraulicky nebo latentně hydraulicky aktivní látky (slínek, strusky, popílků) vznikají hydratované aluminosilikáty sodno-vápenaté podobné zeolitům (geopolymery) typu $M_n[-(Si-O)_z-Al-O]_n \cdot nH_2O$. Syntéza geopolymérů byla prováděna alkalickou aktivací směsi elektrárenského popílku (z el. Opatovice) a křemenného písku při teplotě 70 °C. Jako alkalický aktivátor byl použit roztok NaOH + Na₂SiO₃ v koncentraci 8-12% Na₂O a poměru SiO₂ / Na₂O 1-1.3. Geopolymerní materiály odolávají vlivu agresivního prostředí. Při studiu vlivu teplot v rozmezí 20 – 1100 °C na vlastnosti geopolymérů bylo zjištěno, že pokles pevností po výpalu je výrazně nižší než u zatvrdlého portlandského cementu. Koroze roztoky agresivních solí (sírany, chloridy) na vlastnosti geopolymérů ve sledovaném horizontu 2 let je velmi malá. Průnik Cl⁻ a SO₄²⁻ iontů do hmoty geopolymérů je velmi malý (řádově v 10⁻¹ %) ve srovnání s portlandským cementem. Geopolymerní materiály dávají perspektivu využití odpadních surovin pro přípravu odolných materiálů.

Mikroskopická charakterizace anizometrických částic a reologie jejich suspenzí

Autor: Eva Kotulánová

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: Dr. W. Pabst

Anizometrické částice, tzn. částice protáhlého nebo zploštělého tvaru, mají velký význam v materiálové technologii obecně (např. u vláknitých kompozitů) a zvláště pak v keramické technologii. Např. přidáním wollastonitu do surovinové směsi na výrobu sanitární keramiky se zvyšuje její pevnost po vysušení. Zatímco reologie suspenzí s izometrickými resp. kulovitými částicemi je poměrně jednoduchá a dobře prozkoumaná, reologie suspenzí anizometrických částic je složitější. Nicméně jsou známy vztahy, které dávají do souvislosti reologické chování, přesněji řečeno vnitřní viskozitu, a informaci o tvaru částic v podobě tzv. "aspect ratio" (poměru os). V této práci jsou tyto vztahy shrnuty a je provedena mikroskopická obrazová analýza přírodního wollastonitu. Výsledkem této analýzy je kromě rozdělení velikosti podle plošně ekvivalentního průměru a minimálního resp. maximálního Feretova průměru i kvantitativní charakterizace tvaru částic v této soustavě. Ačkoliv se podle očekávání ukáže, že "aspect ratio" je závislý na velikosti, lze z výsledku mikroskopické obrazové analýzy získat určitý průměrný "aspect ratio", na jehož

základě je možno odhadnout efektivní viskozitu suspenzí. Na druhé straně lze předpokládat, že bude možné získat určitou kvantitativní informaci o průměrném tvaru částic z reologických měření, aniž by bylo třeba provést obrazovou analýzu.

Vliv složení skla na poměr Fe^{II} / Fe^{III} studovaný UV-VIS-IČ spektroskopií

Autor: Hana Kymlová

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Ve většině oxidových sklech je železo přítomno převážně v oxidačním stavu Fe^{III} . Jistý podíl železa může být přítomen také ve stavu Fe^{II} , což závisí na chemickém složení a podmínkách přípravy daného skla. Přítomnost Fe^{II} má výrazný vliv na některé důležité vlastnosti skla. Ovlivňuje jeho absorpci ve viditelné oblasti a mění tak jeho barvu, zvyšuje absorpci záření o vlnové délce kolem 1 μm , a tím výrazně snižuje přenos tepla v tavenině. Redukční schopnost Fe^{II} způsobuje ve Ag^+ a Cu^+ optických vlnovodech vznik kovových částic (Ag^0 či Cu^0), což pak vede k rozptylu a optickým ztrátám vlnovodu. V případě skel pro ukládání vysoce radioaktivního odpadu, která mají vysokou koncentraci Fe, dvojmočné železo zvyšuje teplotu liquidus taveniny. Vysoká teplota liquidus pak vede k technologickým obtížím způsobeným krystalizací. Sledování a ovlivňování obsahu Fe, zvláště jeho dvojmočné formy, je proto velmi důležité. Rovnovážný poměr Fe^{II} / Fe^{III} je pravděpodobně výrazně ovlivněn parciálním záporným nábojem obklopujících kyslíkových atomů, jež závisí na chemickém složení skla a může se vyjádřit veličinou zvanou optická bazicita. V našem experimentu byla připravena série skel s rostoucí optickou bazicitou. U připravených vzorků byla naměřena UV, VIS a IČ spektra. Z absorpčních pásů charakteristických pro jednotlivé formy Fe byla určena jejich koncentrace a diskutován vliv chemického složení.

Koroze skelných vláken ve fyziologickém prostředí

Autor: Daniela Podloucká

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: Doc. Ing. Aleš Helebrant, CSc., Ing. Pavel Šlemín

Inhalace skelných a sklo-keramických vláken používaných při výrobě kompozitních izolačních materiálů může mít za následek vznik nádorových onemocnění. K odstranění takového potenciálního nebezpečí je proto nutné, aby byla použita vlákna rozpustná v prostředí plicní tekutiny.

Cílem práce bylo rozšířit stávající metodiku testování korozní odolnosti žáruvzdorných vláken o metodu využívající optické mikroskopie a porovnat její výsledky s výsledky používaného průtokového testu. Testován byl vzorek žáruvzdorného vlákna se zvýšenou rozpustností ve fyziologických roztocích s obchodním názvem Superwool 607 (SW607). Testy byly provedeny v modifikovaném Gambleho roztoku, který svým složením a hodnotami pH 4,5 a pH 7,4 simuluje plicní prostředí. Optickou mikroskopií s obrazovou analýzou byly sledovány byly úbytky průměru jednotlivých vláken v průběhu expozice. V případě průtokových testů byla rychlost rozpouštění určena z časových závislostí koncentrací SiO_2 , Ca^{2+} a Mg^{2+} v roztoku. Na základě předchozích prací byly zvýšen průtok modelové tekutiny, aby nedocházelo ke snížení rychlosti rozpouštění v důsledku sycení roztoku.

Studium rozpustnosti a změn povrchu trikalciumpfosfátu působením vodných roztoků

Autor: Anna Svobodová

Ročník: 4.

Ústav skla a keramiky

Školitel: doc. Ing. Aleš Helebrant, CSc., Ing. Alena Skrčená

Trikalciumpfosfát (TCP) je anorganický biomateriál, jehož hlavní předností je resorbovatelnost. V organismu se postupně rozpouští a následnou precipitací se přeměňuje na kostní apatit (HCA). Rychlost rozpouštění závisí i na povrchu implantovaného materiálu v kontaktu s roztokem. Cílem práce byla experimentální simulace tohoto procesu. Drť slinutého β -TCP byla rozpouštěna při teplotách 37, 60 a 80°C v roztocích o pH 3; 5,5 a 7, připravených z demineralizované vody. Pro testování byl zvolen dynamický proces (průtok roztoku 0,25 ml.min⁻¹), který lépe simuluje chování materiálu v organismu. Doba expozice činila 5 dní. Měřením koncentrace Ca²⁺ iontů (AAS) a PO₄³⁻ iontů (spektrofotometricky) bylo prokázáno rozpouštění při hodnotách pH<7. Stejně tak optická mikroskopie a obrazová analýza LUCIA ukazuje rozpouštění v závislosti na snižujícím se pH, kdy se řádově snižuje velikost slinutých částic. Elektronová mikroskopie pak prokázala rozpouštění spojovacích krčků slinutého materiálu a EDS mikroanalýzou byla zaznamenána také změna poměru Ca/P. Metoda BET, kterou byl měřen měrný povrch částic, potvrdila jeho zvětšování, které rostlo se snižujícím se pH. Při pH=3 je tato hodnota dokonce srovnatelná s hodnotou měrného povrchu neslinovaného TCP.

Systém analýzy cementářského slínku

Autor: Lucie Štěpánková

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: Doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

V současné době je jedním z hlavních směrů ve výrobě portlandského cementu užití tzv. alternativních paliv namísto dosud užívaného uhlí. Alternativní paliva (převážně odpadní tříděné látky) vnášejí do procesu pálení další příměsi, především těžké kovy, a také ovlivňují vlastní proces pálení cementářské suroviny. Tyto vlivy se pak mohou projevit v chemickém a mineralogickém složení cementářského slínku. V práci je vypracován systém hodnocení cementářského slínku a to: rtg. fluorescenční analýzou (celkové chemické složení), rtg. difrakční analýzou (mineralogické složení) a mikroskopickou analýzou (nábrus). Rtg. difrakční prášková analýza využívá vyhodnocovacího programu X'pert ve spojení s databází minerálů PDF2, jenž umožňuje identifikaci jednotlivých modifikací slínkových minerálů. Mikroskopická analýza nábrusů je prováděna na optickém mikroskopu s digitálním analyzátozem obrazu systému Lucia G, kdy lze zjistit habitus případně i obsah jednotlivých fází. Tento systém hodnocení cementářského slínku bude použit při sledování vlivů procesních parametrů na složení cementářských slínků české provenience. Projekt systému je podporován Svazem výrobců cementu ČR.

Studium koloidní reologie vodných suspenzí práškových směsí na bázi ZrO_2

Autor: Ivana Zedníková

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.

Práce je zaměřena na studium koloidní reologie vodných suspenzí práškových směsí ZrO_2 používaných pro přípravu progresivních keramických materiálů (inženýrské keramiky, biokeramiky). Na základě měření závislosti základních reologických parametrů suspenzí (zdánlivé viskozity η a meze toku τ_0) na hodnotě pH je stanovena oblast izoelektrického bodu (IEP) studovaných suspenzí. Stanovené hodnoty IEP suspenzí jsou porovnány s hodnotami IEP získaných na základě měření hodnot ζ potenciálu metodou ESA (stanovení IEP s nároky na nákladné přístrojové vybavení).

Bylo potvrzeno, že měřením závislosti hodnoty meze toku suspenze na hodnotě pH lze získat přesnější hodnoty IEP v porovnání s měřením hodnoty zdánlivé viskozity suspenzí.

V práci je dále studován vliv chemického složení, charakteru povrchů a velikosti částic studovaných práškových oxidových směsí na charakter naměřených závislostí.

Navržená metodika umožňuje na základě reologických měření experimentálně stanovení oblasti IEP suspenzí a vymezení oblastí vhodných pro zpracování práškových směsí v kapalně fázi (lití suspenzí do sádrových forem, koagulační lití atd.).

Studentská vědecká konference 2003

Sekce: ANORGANICKÉ NEKOVOVÉ MATERIÁLY II

Ústav skla a keramiky FCHT VŠCHT Praha, 21.11.2003

Zahájení v 9:00 hodin, posluchárna A02

Účastníci:

Petra Cincibusová: Příprava vrstev na skle metodou sol-gel s obsahem železa

Marek Hejda: Příprava bioaktivních vrstev biomimetickým postupem na slitině Ti-6Al-4V

Zdeněk Kočí: Náhrada vláken soustavy $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$ za vlákna biorozpustná

Lukáš Mergl: Vliv oxidů vzácných zemin na některé parametry olovnatých křišťálových skel

Markéta Veličková: Polykrystalická tetragonální ZrO_2 keramika s řízenou pórovitostí

Karolína Vlčková: Příprava suspenzí pro kompozitní keramiku $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ a charakterizace její mikrostruktury

Petra Zamazalová: Příprava mullitové keramiky z odpadních kamenců

Komise:

předseda:

Doc.Ing. Martin Maryška, CSc.

tajemník:

Ing. Miroslav Rada, CSc.

členové:

Doc.Ing. Jaroslav Kutzendörfer, CSc.

Dr.Dipl.-Min. Willi Pabst

Doc.Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Program:

8:45 **vyvěšení posterů**

9:00 zahájení (posluchárna A02)

9:15 představení u posterů (prostory Ústavu skla a keramiky - 5 minut na jednu práci)

10:00 diskuse u posterů

11:00 zasedání komisi

11:45 vyhlášení výsledků (posluchárna A02)

Příprava vrstev na skle metodou sol-gel s obsahem železa

Autor: Petra Cincibusová

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: Prof. Ing. Josef Matoušek, DrSc.

Metoda sol-gel umožňuje přípravu vrstev na povrchu substrátů z různých materiálů. Tyto vrstvy zlepšují vlastnosti podložního materiálu a mohou měnit absorpci záření ve viditelné části spektra.

Cílem předkládané práce bylo připravit barevnou vrstvu s obsahem železa. Výchozími látkami byly tetraethoxysilan (TEOS), který vytváří základní síť SiO_2 , jako organické rozpouštědlo byl použit ethanol a acetylaceton. Za zdroj železa byl na základě literární rešerše zvolen dusičnan železitý ($\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$). Jako substrát byla použita sodno-vápenatá mikroskopická podložní skla. Vrstvy byly nanášeny na substrát metodou dip-coating. Vzorky byly po vysušení vypalovány v atmosféře vzduchu za teplot do 500°C . U takto připravených žlutých nebo hnědých vrstev byl sledován vliv složení solu na výslednou barvu a její sytost. Získané vrstvy byly homogenní, dobře přilnuly k povrchu substrátu. Kvalita vrstev byla zjišťována vizuálně a pod optickým mikroskopem.

Příprava bioaktivních vrstev biomimetickým postupem na slitině Ti-6Al-4V

Autor: Marek Hejda

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: doc. Ing. Aleš Helebrant, CSc., Ing. Alena Skrčená

Bioaktivní materiály, jako jsou sklo a sklokeramika, reagují aktivně s biologickým systémem a komplex probíhajících reakcí vede k chemické vazbě s kostní tkání. Klíčovou podmínkou pro vznik této vazby je dostatečná tvorba vrstvy kostního apatitu (HCA), která se tvoří díky interakci implantátu s tělními tekutinami. Během ní se na povrchu implantátů tvoří gelová vrstva umožňující adsorpci vápenatých a/nebo fosforečnanových iontů. Navíc se převodem složek materiálu do tělní tekutiny zvyšuje její přesycení vůči HCA. Pro mechanicky namáhané implantáty jsou často používány kovy, jako Ti a jeho slitiny, které jsou však bioinertní, tzn. netvoří přímou vazbu s živou tkání. Jejich bioaktivního chování je možné docílit pomocí povrchové úpravy v kyselině a roztoku NaOH.

Navrhovaný biomimetický způsob přípravy bioaktivní Ti slitiny napodobuje výše zmíněné děje. Cílem práce bylo připravit tenké Ca-P vrstvy různého složení na povrchu Ti slitiny, jejichž výhodou je přímé srážení z roztoku a možnost měnit poměr vápníku a fosforu ve vrstvě.

Ti slitina (Ti-6Al-4V) byla po úpravě v kyselině fluorovodíkové a roztoku NaOH exponována v roztocích obsahujících vápenaté a fosforečnanové ionty při různých pH (4 a 6). V roztocích po expozici byla metodou AAS stanovena koncentrace Ca^{2+} a spektroskopicky koncentrace PO_4^{3-} iontů. U obou měřených koncentrací byl zaznamenán pokles, což naznačuje usazování těchto iontů na povrchu vzorku. Ten byl sledován pomocí optické mikroskopie s obrazovou analýzou LUCIA, jež potvrdila přítomnost vrstvy na vzorku, ne však její spojitost. Přítomnost tenké souvislé vrstvy s proměnlivým poměrem Ca/P prokázala až elektronová mikroskopie s EDS mikroanalýzou.

Náhrada vláken soustavy $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$ za vlákna biorozpustná

Autor: Zdeněk Kočí

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kutzendörfer, CSc.

Práce se zabývala náhradou žárovzdorných vláken (systém $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$) za vlákna se zvýšenou rozpustností ve fyziologických kapalinách (systém $\text{SiO}_2 - \text{CaO} - \text{MgO}$) pro přípravu vláknitých žárovzdorných výrobků.

Cílem práce bylo upravit v laboratorních podmínkách technologický postup pro použití biorozpustných vláken. V první řadě byla sledována doba a intenzita mixování, změna pH během přípravy vzorku. Následoval výběr vhodného pojiva na bázi polyakrylátů. Dále bylo stanoveno optimální množství pojiva a dalších přísad (množství NaAlO_2 a $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$) pro biorozpustná vlákna.

K porovnání obou druhů vláken bylo použito následujících kritérií: pevnost v tahu, objemová hmotnost, ohebnost, měrná tepelná vodivost a obsah organických látek (ztráta žháním).

Vliv oxidů vzácných zemin na některé parametry olovnatých křišťálových skel

Autor: Lukáš Mergl

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 se řadí tyto prvky: cer, praseodym, neodym, promethium, samarium, europium, gadolinium, terbiu, dysprosium, holmium, erbium, thulium, ytterbium a lutecium.

Ve sklářství se sloučeniny vzácných zemin využívají především jako odbarviva, k výrobě brýlových skel, skel pro optické přístroje, laserových, filtrových a tepelně odolných skel, skleněných vláken a elektrod. Mají též uplatnění v magnetooptických paměťových prvcích či hermetizačních vrstvách pro polovodiče a používají se, zejména cer a jeho sloučeniny, pro mechanické leštění skel.

Vzhledem k tomu, že cena těchto speciálních sloučenin v posledním období prudce poklesla, otevírá se možnost pro jejich širší aplikaci ve sklářském průmyslu. K tomu je však třeba znát jejich vliv na důležité parametry - viskozitu, povrchové napětí, elektrickou vodivost, krystalizační a dilatometrické veličiny, hydrolytickou odolnost, L^* , a^* , b^* souřadnice i index lomu, protože v literatuře kromě optických vlastností se tyto údaje vyskytují jen velmi sporadicky.

Tento úkol s aplikací na 24%ní olovnatý křišťál bude předmětem diplomové práce. Zde předkládaná práce pak zpracovává první část tohoto úkolu – vliv obsahu oxidů holmia a samaria na některé z výše uvedených parametrů.

Polykrystalická tetragonální ZrO₂ keramika s řízenou pórovitostí

Autor: Markéta Veličková

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: doc. Jiří Havrda

Cílem práce byla příprava licí suspenze ZrO₂-3mol.% Y₂O₃ s kineticky stabilní pórotvornou přísadou pro přípravu keramiky s řízenou pórovitostí. Výchozími látkami byly PE sférické částice (d=1000 μm) a ZrO₂ prášek (d=0,6 μm). Pro ověření stability PE částic ve vodném prostředí se vycházelo ze Stokesova zákona, platného pro kulové částice o průměru menším než 100 μm. Z experimentálního ověření vypočteného pohybu PE částic s různým průměrem vyplynulo, že s rostoucím průměrem nad 300 μm se zvyšuje odchylka od vypočtené hodnoty. Při výpočtu stability částice v suspenzi byla do něho zahrnuta. Připravená suspenze obsahovala 77 hm.% ZrO₂-3mol.% Y₂O₃ prášku, 1,4 hm.% ztekutidla Dolapix a vodu. Z reologických měření bylo zjištěno, že suspenze je časově závislá, pseudoplastická kapalina, s hodnotami $K=3,91 \text{ Pa}\cdot\text{s}^n$, $n=0,37$ v rovnici $\tau=K(\dot{\gamma})^n$. Zdánlivá viskozita při $\dot{\gamma}=0,041 \text{ s}^{-1}$ je $\eta=26,10 \text{ Pa}\cdot\text{s}$. Tato hodnota η spolu s hustotou suspenze $\rho=2795,6 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ byla použita pro výpočet úpravy hmotnosti a velikosti PE částic. Peletizací byl ZrO₂ prášek nanesen na povrch PE přísady. Z výpočtu předpokládaná hmotnost jedné částice byla $1,48\cdot 10^{-3} \text{ g}$, průměrná hodnota experimentálně připravené $1,47\cdot 10^{-3} \text{ g}$. Do suspenze byly vmíchány 2 hm.% této pórotvorné přísady a nechána 1 hod stát. Homogenita rozložení částic v suspenzi byla zjištěna Andreasenovou metodou. Z výsledků bylo možné usoudit, že tento postup lze použít jako seriózní odhad pro přípravu licí suspenze s kineticky stabilní pórotvornou přísadou.

Příprava suspenzí pro kompozitní keramiku Al₂O₃-ZrO₂ a charakterizace její mikrostruktury

Autor: Karolína Vlčková

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Vodné suspenze pro výrobu ZTA (zirkonia toughened alumina) keramiky litím byly připraveny třemi způsoby: 1. společným mletím zirkoničitého a korundového prášku v laboratorním planetovém mlýnku a následovalo rozdružení nehomogenit pomocí ultrazvuku (UP 200S Dr. Hielscher), 2. mletím ve výše uvedeném mlýnku s následným vakuováním a rozdružením nehomogenit ultrazvukem (UC006 DM1 Tesla), 3. homogenizace v PE láhvi pomocí zirkoničitých koulí na laboratorní třepačce a opět byl použit ultrazvuk (UP 200S Dr. Hielscher) k rozdružení nehomogenit. Z připravených suspenzí byly nality vzorky ve tvaru tablet, vypáleny na 1530°C a byla stanovena jejich objemová hmotnost a zdánlivá a skutečná pórovitost za předpokladu obsahu pouze tetragonální fáze ZrO₂. Na leštěných, tepelně leptaných nábrusech pak byla sledována mikrostruktura vzorků. Ze stavu vzniklé mikrostruktury a stanovených kritérií hutnosti byl pak vyhodnocen optimální způsob přípravy suspenzí pro lití ZTA keramiky.

Příprava mullitové keramiky z odpadních kamenců

Autor: Petra Zamazalová
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Martin Maryška, CSc.

Mullit ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$) jako jediná stabilní sloučenina v soustavě Al_2O_3 - SiO_2 představuje jednu z hlavních fází keramických materiálů na bázi jílových surovin. Kromě vysoké teploty tání se vyznačuje vynikající chemickou odolností a vysokou mechanickou pevností, neprodělává při chladnutí žádné polymorfni přeměny, které bývají spojeny s objemovými změnami. Je tedy žádoucí, aby byl obsah mullitu v keramickém materiálu co nejvyšší. Dodatečným zvýšením obsahu oxidu hliníku ve výchozí surovině až na teoretických 72% (což při výsledném stechiometrickém poměru $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2 \sim 3/2$ odpovídá složení čistého mullitu) by se daly zhodnotit méně kvalitní jílové suroviny. Jako zdroj hliníku byl použit odpadní kamenec (síran hlinito-amonný).

V této práci byl charakterizován homogenizovaný vzorek směsi jílu s hydratovanými oxidy hliníku a také jíl samotný. Směs i jíl byly páleny na teploty $1100^\circ\text{C}/1\text{h}$, $1200^\circ\text{C}/1\text{h}$ a $1200^\circ\text{C}/4\text{h}$. U vypálených vzorků byly stanoveny pevnosti, objemové hmotnosti a smrštění výpalem. Dále bylo pomocí RTG difrakce stanoveno fázové složení jak vypálených vzorků, tak výchozích směsí.

Cílem práce je určit zda má zvýšení obsahu hydratovaných oxidů hliníku ve výchozí jílové surovině příznivý vliv na tvorbu mullitu.

Studentská vědecká konference 2003

Sekce: ANORGANICKÁ TECHNOLOGIE

Ústav anorganické technologie, 21.11.2003
Zahájení v 9:00 hodin, budova A, místnost č. 32

Komise (ústav 105):

Doc.Ing. Daria Schrötterová, CSc. - předseda
Dr.Ing. Josef Krýsa
Dr.Ing. Vlastimil Fíla
Ing. Martin Paidar, PhD.
Ing. Ilona Jandová
Ing. Miloslav Lhotka, PhD. - organizační tajemník

Přihlášeno: 8 účastníků

Roman Kodým
René Ludwig
Jiří Macek
Uwe Möbius

Daniel Mohr
Christian Oettel
José Pires
Petra Podubecká (2x)

Srovnávací studie elektrokatalytické aktivity nových typů katalyzátorů pro nízkoteplotní palivové články.

Autor: Roman Kodým
Ročník: V.
Ústav: anorganické technologie, VŠCHT
Školitel: Doc.Dr.Ing. Karel Bouzek

Jednou z mnoha oblastí, kterou se současná elektrochemie intenzivně zabývá, je problematika palivových článků. Ty představují alternativní zdroj elektrické energie. Uspokojivé rychlosti elektrodových dějů, a to zejména u nízkoteplotních palivových článků, nelze dosáhnout bez použití účinného katalyzátoru. V současnosti jsou používány výhradně katalyzátory na bázi platinových kovů. Jejich zásadními nevýhodami jsou vysoká cena a citlivost ke katalytickým jedům. Výzkum v této oblasti se ubírá několika směry: a) zvýšení odolnosti katalyzátoru proti katalytickým jedům, s tím je spojená i menší spotřeba katalyzátoru a b) nahrazení platinového katalyzátoru jiným srovnatelně účinným, jehož cena je výrazně nižší.

V rámci této práce budou shrnuty výsledky srovnávací studie elektrokatalytické aktivity nově vyvinutých katalyzátorů vzhledem k oxidaci vodíku, redukci kyslíku a náchylnosti k otravě. Studovány byly katalyzátory na bázi Pt kovů a jejich slitin, neplatinových kovů (jako Cu a Ni) legovaných platinovými kovy a katalyzátory neplatinové. Některé z nich byly naneseny na uhlíkovém nebo keramickém nosiči, zbývající pak byly studovány samostatně. Při studiu katalytické aktivity byla použita rotující disková elektroda ze skelného uhlíku. Katalyzátor byl fixován na jejím povrchu pomocí techniky tenkého filmu. Katalytická aktivita byla stanovena pomocí Kouteckého - Levičovy analýzy. Katalytické aktivity nových katalyzátorů byly srovnány s komerčně dostupným katalyzátorem E-TEK.

Selective removal of copper ions from waste water by ion exchange

Student: René Ludwig

Year of Study: V.
Department: Inorganic technology VŠCHT Prague
University of Applied Sciences Leipzig
Supervisor: Ing. Martin Paidar, Ph.D., Doc. Dr. Ing. Karel Bouzek

The contamination of our environment with heavy metal ions represents a serious problem, which has to be solved. Main sources of copper pollution are galvanoplasting industry and mine water. The ion exchange process offers a viable possibility to solve this problem.

In the present work an ion exchange resin Purolite A 832 was used. It is macroporous, weak base resin with a polyacrylic matrix supporting tetraethylenepentaamine functional groups. The process is based on the high stability of the complex formed between the ion exchanger active groups and the metal ions.

Under common conditions it removes all species capable to form complex with the functional groups. By modification of regeneration procedure it is possible to achieve its high selectivity for copper ions. The influence of regeneration procedure, pH-value of the contaminated solution and the heavy metal concentration on process efficiency was studied. The principal purpose of the experiments is to find ecologically acceptable process with relatively low operating cost for the removal of copper ions from mine water with complex composition changing in time.

Dezaktivace katalyzátoru pro aromatizaci methanu

Autor: Jiří Macek
Ročník: IV.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Neoxidativní katalytická aromatizace methanu, používající jako katalyzátory tvarově selektivní mikroporézní materiály, je jednou z možností zpracování zemního plynu na produkty vyšší užitné hodnoty, zejména benzen a další aromáty. V průběhu tohoto procesu dochází k poměrně rychlé dezaktivaci katalyzátorů vlivem vzniku uhlíkatých úsad na jejich povrchu a uvnitř mikroporézní struktury. Tato práce je zaměřena na studium možností potlačení dezaktivace těchto katalyzátorů a možnosti jejich zpětné regenerace. Byly navrženy a experimentálně sledovány dva postupy: (i) přidavek CO_2 do vstupní směsi, (ii) modifikace katalyzátoru Mo/ZSM5 přidavkem Co. Byla též testována možnost regenerace dezaktivovaných katalyzátorů zpětnou oxidací uhlíkatých úsad pomocí směsi $\text{N}_2 - \text{O}_2$. Katalytická aktivita připravených Mo/ZSM5 a Mo-Co/ZSM5 katalyzátorů byla testována v průtočném reaktoru s katalytickým ložem. Bylo zjištěno, že nízká koncentrace CO_2 ve vstupní směsi potlačuje tvorbu inertního uhlíku a tím prodlužuje aktivitu katalyzátoru. Při vyšší koncentraci CO_2 klesá obsah žádaných produktů ve výstupní směsi a selektivita k benzenu. Modifikace Mo/ZSM-5 kobaltem neměla zásadní efekt na dosažené výsledky. Dezaktivované katalyzátory lze též částečně regenerovat pomocí směsi $\text{N}_2 - \text{O}_2$.

Testing of electrocatalytic activity of the PEM fuel cell catalysts

Autor: Uwe Möbius
Year of study: III.
Department: Inorganic technology VŠCHT Prague,
Mechanical and Energy Engineering HTWK Leipzig

Supervisor: Ing. Sabina Moravcová, Doc.Dr.Ing. Karel Bouzek

The fossil fuel like coal, oil or gas is not for ever and we need a new system for energy production. This is the reason why the electrochemistry searches about fuel cell. All types of fuel cells can transform chemical energy involved in burning of hydrogen in oxygen directly into the electric energy. In this study Proton-Exchange-Membrane (PEM) fuel cell is considered.

PEM fuel cell consists of a polymer membrane and two electrodes (anode and cathode) loaded by catalyst. It is typically represented by Pt or Pt metals alloy. Pt is the material with very high catalytic activity. But it suffers by two main disadvantages, namely high price and sensitivity to the catalytic poisoning by CO. There are two solutions of these problems. First one consists in enhancement of the catalyst resistivity against poisoning, allowing thus for the catalyst load reduction. Another one is focused on the replacement of the platinum metal catalyst by the new type of materials. In the present study electro catalytic activity of bare platinum electrode for the hydrogen oxidation and oxygen reduction, as well as the resistivity against CO poisoning, was followed using rotating disk electrode (RDE) and Koutecky-Levich analysis. Subsequently it was compared with nanosized Pt and Pt/Ru catalyst on the carbon support fixed on the glassy carbon RDE by the thin film technique. The obtained results document clearly advantages of application of the later form of Pt.

Selective nitrate removal from drinking water by combination of ion exchange and electrochemical reduction

Author: Daniel Mohr
Year of study: III.
Department: Inorganic technology VŠCHT Prague
University of Applied Sciences Leipzig
Supervisor: Ing.Martin Paidar, Ph.D., Doc.Dr.Ing. Karel Bouzek

A high concentration of nitrates in water is not good to the environment and human health. The main sources of nitrates are intensive agriculture and industrial wastewater. Therefore the EU gives 50 mg/dm³ of nitrate concentration in drinking water as a maximum permitted limit.

Previous research has shown that ion exchange is one of the suitable techniques for selective lowering of nitrate concentration in water. A main disadvantage of ion exchange represents large amount of spent regeneration solution. This problem can be solved by the application of electrolysis capable to reduce the nitrate. It enables us to use regeneration solution in a close cycle stream.

In the present work the strong basic ionex IRA 996 (Rohm & Haas, USA) in hydrogen carbonate form was used for the nitrate removal. The electrolyser with parallel plate electrodes and fluidized bed of inert particles was used for treatment of the spent regeneration solution. The laboratory scale apparatus has shown promising results, but during scale up to the pilot plant, low efficiency of electrochemical nitrate reduction was achieved. It is probably caused by unsuitable concentration profile and current distribution inside the cell. Therefore aim of present work is to optimize the construction of the electrolytic cell.

Modification and Determination of Nafion Polyaniline Composite Membranes

Author: Christian Oettel
Year of study: III.
Department: Inorganic Technology VŠCHT Praha,
Mechanical and Energy Engineering HTWK Leipzig
Supervisor: Ing. Sabina Moravcová, Doc.Dr.Ing. Karel Bouzek

In the last 20 years the fuel cell was rediscovered as an effective method of energy production. In the past, the fuel cell was just used in special fields, but times have changed and now it is the task to develop fuel cells with high efficiency and low costs in mass production. Therefore it is important to search for other, cheaper construction methods and materials. Large potential of conducting polymers in various fields were discovered during the last two decades, some of them being utilized as a catalyst support in the fuel cell. Polyaniline (PAni) is one of the most widespread conducting polymers characterised by high stability in the acidic environment. The Nafion[®] surface was modified with PAni on one side of the membrane. The aim was to study the adherence, structure and kinetic of the PAni layer growth. In the next step composite permeability for methanol and electrochemical activity was determined. For the investigation of the film surface structure and thickness Scanning Electron Microscopy was used. Diffusion cell consisting of two compartments containing 1 M MeOH solution and demineralised water separated by the studied sample was used to determine composite permeability. The electrochemical activity of the polymerised (C₆H₄NH)_n layer was determined by the means cyclic voltammetry. Our further research will focus of the monomer diffusion behaviour through the composite and the possibility of modifying both sides of the Nafion[®] surface with PAni.

Measurement and Mathematic Modeling of Light Alkanes Separation on the Composite Zeolite membrane

Author: José Pires
Year of Study: V.
Department: Inorganic technology VŠCHT Praha
Supervisor: Dr.Ing.Vlastimil Fila

Zeolite membranes have many possible applications in the chemical industry. Comparing them with widely used organic membrane their higher thermal and chemical stabilities not only make inorganic membranes very promising for separation applications, but also for reaction enhancement (e.g. separation of aromatic and aliphatic hydrocarbons in naphtha craker feedstocks, enhancement of conversion in the water-gas shift reaction carried out under lower temperature etc.)

The apparatus for characterization of the cylindrical membranes by diffusion and permeation measurements under steady state conditions was built up. A composite silicalite-1 membrane was prepared by synthesis from tetraethyl orthosilicate (TEOS) and tetrapropylammonium hydroxide (TPAOH). The separation properties of prepared membrane was tested in the binary system CO₂ and CH₄ at different temperature (20 °C to 400 °C), pressure and input mixture composition. The simple mathematical model of separator based on the mass balances of individual species in permeate and retentate compartment of separation module was developed. The permeability of CO₂ and CH₄ was calculated.

Studie vlivu stupně sulfonace na transportní vlastnosti iontové selektivní membrány na bázi sulfonovaného polyfenylenoxidu

Autor: Petra Podubecká

Ročník: V.
Ústav: Ústav anorganické technologie, VŠCHT
Školitel: Doc.Dr.Ing. Karel Bouzek

V poslední době vzrůstá zájem o využití palivových článků jako alternativních zdrojů energie. Typickým představitelem nízkoteplotních palivových článků je článek typu PEM (Proton Exchange Membrane), ve kterém klasický kapalný elektrolyt nahrazuje polymerní iontově selektivní membrána. Nejčastěji je používána perfluorovaná membrána typu Nafion. Přes svou vysokou chemickou a tepelnou stabilitu má však tato membrána několik nedostatků (vysoká cena, nízká iontová vodivost při teplotách nad 100 °C,...). Z tohoto důvodu se v současnosti řada výzkumných pracovišť intenzivně zabývá hledáním nových typů membrán minimalizujících vliv uvedených nedostatků. V uplynulých letech byly v naší laboratoři studovány transportní charakteristiky membrán na bázi sulfonovaného polyfenylenoxidu. Tento materiál vykazuje transportní vlastnosti vhodné pro potenciální využití v palivových článcích typu PEM. Významnou informací z hlediska optimalizace jejich syntézy představuje závislost vlastností membrány na stupni sulfonace základního materiálu. V rámci této práce byla testována závislost iontové výměnné kapacity, kinetiky iontové výměny a iontové vodivosti membrán v rozsahu stupně sulfonace cca 10 až 60 %. Pomocí teorie spřažené difúze a absolutní pohyblivosti za použití Einsteinovy rovnice byly z experimentálně stanovených parametrů vypočteny hodnoty difúzních koeficientů protonu a sodného iontu pro různé stupně sulfonace polymeru.

Stabilizace arsenu v hornické hlušině na základě sorpčních vlastností hliníku a vápníku

Autor: Petra Podubecká
Ročník: V.
Ústav: Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH
Školitel: Dr. Heinz Seidel

Skládky hornické hlušiny představují vážný ekologický problém. Tyto haldy totiž obsahují velké množství arsenu, který může být velmi snadno vlivem měnících se podmínek prostředí vyluhován a způsobit tak kontaminaci půdy a podzemní vody. Aby se této kontaminaci životního prostředí zabránilo, je nutné arsen v těchto haldách stabilizovat prostřednictvím vhodné úpravy hlušiny. V praxi se k odstraňování arsenu z pitné vody běžně používají hlinité soli. Řešením by tedy mohl být přídavek takové látky, která by arsen fyzikálně či chemicky adsorbovala.

V této práci byl sledován vliv příměsí hliníku a vápníku do hornické hlušiny na množství vyluhovaného arsenu. Použita byla hornická hlušina po zpracování cínu z Gottesbergu v Krušných horách, která obsahuje 500-1000 mg arsenu na kg. Pokusy byly provedeny jednak v míchané 10 %-ní suspenzi hornické hlušiny ve vodě za použití tzv. mikrokosmu (vsádkový míchaný reaktor s rozsáhlou měřicí a regulační technikou), ale také v násypu, což mělo ukázat, jak by bylo možné celý proces realizovat v praxi. Sledováno bylo množství rozpuštěného arsenu po provedené stabilizaci materiálu. Rozpuštěné sloučeniny arsenu byly kvantifikovány metodou IC-ICP-MS.

Bylo zjištěno, že jak přídavek hliníku ve formě $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 18\text{H}_2\text{O}$, tak vápníku ve formě CaCO_3 při současném dosažení neutrálního pH prostředí umožňuje dlouhodobou stabilizaci materiálu.

Studentská vědecká konference 2003

Sekce: KOVOVÉ MATERIÁLY

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství, 21.11.2003
Zahájení v 9:00 hodin, budova A, místnost A50

Komise (ústav 106):

Předseda: prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Členové: doc. Ing. Jitka Jandová, CSc.

Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Ing. Tomáš Prošek, Ph.D.

Přihlášeno: 11 účastníků

Lukáš Bláha

Hana Čížová

Dagmar Eisenmannová

Lenka Herzogová

Markéta Kropáčová

Radka Malá

Alena Michalcová

Magda Morťaniková

Michal Novák

Martina Toufarová

Barbora Volejníková

Plazmová nitridace nástrojové oceli legované niobem vyrobené technologií práškové metalurgie

Autor: Lukáš Bláha
Ročník: 1.
Ústav: kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák

Nitridace se běžně využívá ke zlepšení tvrdosti a tribologických vlastností povrchu nástrojů a tím i ke zvýšení jejich životnosti. Jako velmi perspektivní se jeví plazmová nitridace. S využitím této technologie lze dosáhnout požadované tloušťky a tvrdosti vrstvy za kratší dobu a při nižší teplotě než při běžné nitridaci v plynu. Cílem této práce bylo popsat vliv podmínek nitridace na mikrostrukturu a tvrdost vrstev za účelem optimalizace podmínek nitridace nástrojové oceli obsahující 2,5%C, 3,3%Si, 6,2%Cr, 2,2%Mo, 2,6%V, 2,6%Nb, 1,0%W vyrobené technologií práškové metalurgie. Ocel byla zakalena z 1100°C a popuštěna třikrát po dobu 1h při teplotě 550°C. Nitridace byla prováděna při teplotách 470, 500 a 530°C a dobách výdrže 30, 60, 120 a 180 min. Bylo provedeno měření povrchové tvrdosti, profilů mikrotvrdosti a tloušťky vrstev v závislosti na teplotě a době nitridace.

Vysokoteplotní oxidace titanu

Autor: Hana Čížová
Ročník: 5.
Ústav: kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Titan a jeho slitiny jsou perspektivním materiálem pro celou řadu použití v různých průmyslových směrech i v běžném životě. Je to díky jeho nízké hustotě, vysokému poměru pevnosti a hustoty a výborné korozní odolnosti v řadě agresivních prostředí. Jeho nevýhodou je nízká odolnost proti vysokoteplotní oxidaci, což omezuje jeho použití do teploty maximálně 500°C. Jednou z přísad zvyšující odolnost proti oxidaci za vysokých teplot je křemík. Cílem práce je porovnání oxidační odolnosti slitin TiSi₂, TiSi₈ a čistého titanu při teplotách 850°C a 1050°C na vzduchu. U oxidovaných vzorků je vyhodnocována mikrostruktura a fázové složení oxidických vrstev. Kinetika oxidace je sledována měřením hmotnostních přírůstků na čase.

Určení techniky zdobení hlavičky a záštity románského meče

Autor: Dagmar Eisenmannová
Ročník: 2.
Ústav: kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Pomocí klasické optické mikroskopie a elektronové mikroskopie s analýzou EDAX bylo možno určit složení kovů, použitých ke zdobení hlavičky a záštity románského meče z depozitáře vojenského historického muzea v Praze. Po detailní prohlídce a dokumentaci zmíněných součástí meče na stereomikroskopu bylo možno usuzovat i na použitou techniku zdobení. To bylo provedeno plátováním (tauširováním), kdy do vyryté mřížky na povrchu zdobeného prvku ze železa by zatepáván zdobící kov ve formě plíšků či jednotlivých nebo spletených drátků. Ve studovaném případě byly jako zdobné kovy použity stříbro, měď a mosaz.

Identifikací kovů, použitých ke zdobení hlavičky a záštity meče i určením techniky zdobení nebylo zpochybněno udávané časové zařazení meče, zpřesnění tohoto údaje či odhalení původu meče se však doposud ani přes konfrontaci se širokým spektrem specializované (historicky a typologicky zaměřené) literatury nepodařilo.

Recyklace úletů se zvýšeným obsahem kobaltu

Autor: Lenka Herzogová
Ročník: 2.
Ústav: kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Petr Dvořák, Ing. Hong Vu, Ph.D.

Při nanášení kovových povlaků na tabulové sklo v závodě Glaverbel Czech, a.s. Teplice se z kouřových plynů zachycují úlety, které obsahují 31% Co, 14% Fe a 13% Cr. Loužením úletů v 25% H_2SO_4 , při 80°C, poměru k:p 20:1 po dobu 3h se extrahovalo 96% Co, 95% Fe a 72% Cr. Hydrolytickým srážením při řízeném pH za použití K_2CO_3 nebo Na_2CO_3 se z výluhů odstranilo téměř 100% Fe, ale jen 80% Cr, který byl přítomen jako Cr^{3+} . Zbylých 20% Cr vázaného v úletech pravděpodobně jako Cr^{6+} zůstalo v roztoku i po vysrážení zásaditého uhličitanu kobaltnatého -výchozí suroviny pro elektrolytickou výrobu Co. Na základě literárních údajů a modelových laboratorních testů byly stanoveny optimální podmínky elektrolyzy a limitní koncentrace Cr v elektrolytu (50 mg Cr/l). Při vyšších koncentracích Cr v elektrolytu měl vyloučený kobalt houbovitý charakter. Po rozpuštění zásaditého uhličitanu kobaltnatého, který obsahoval 0,16-0,16% Cr, byl obsah Cr z původní koncentrace 300 mg Cr/l snížen na cca 30 mg Cr/l po jeho zredukování siřičitanem sodným. Z rafinovaného elektrolytu byl vyloučen kompaktní kovový kobalt. Výsledky práce potvrdily možnost praktického využití odpadních kobaltových úletů jako hodnotné suroviny pro výrobu kovového kobaltu. V současné době se recykluje omezené množství kobaltových úletů za vzniku oxidů kobaltu, zbytek se jako nebezpečný odpad deponuje na řízené skládce.

Úprava Sn – stěrů získaných při rafinaci olova

Autor: Markéta Kropáčová
Ročník: 5.
Ústav: kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Dalibor Vojtěch, doc. Ing. Jitka Jandová, CSc.

Olověné odpady jsou cennou surovinou pro výrobu olova a dalších doprovodných kovů. Tyto odpady, zejména vyřazené olověné akumulátory, jsou zpracovávány v Kovohutích Příbram, a.s.

Olovo z odpadů je nutné rafinovat a odstranit z něj příměsi (měď, cín, arsen, antimon a ušlechtilé kovy). Po odstranění mědi se Sn, As a Sb odstraňují kyslíkovou rafinací při teplotách 500 – 600°C. Při postupu kyslíkové rafinace se využívá větší afinity Sn, As a Sb ke kyslíku ve srovnání s olovem a vzniklé oxidy vlivem své nižší hustoty vyplouvají na povrch olova. Tyto oxidy jsou odstraňovány v podobě stěrů, které jsou však velmi jemné, práškové a zvyšují tak prašnost pracovního prostředí.

Naším úkolem bylo vhodným činidlem zlepšit kusovost těchto stěrů. Vybrali jsme několik běžných anorganických látek, a porovnávali výslednou kusovost stěru, množství a cenu použitého činidla. Na základě těchto srovnání jsme určili vhodné činidlo, jehož použití v praxi bude optimální.

Koroze pozinkované oceli v modelovém prostředí betonu

Autor: Radka Malá
Ročník: 2.
Ústav: kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Milan Kouřil, Martin Bojko

Uhlíková ocel, z níž je vyráběna výztuž do betonu, není z dlouhodobého hlediska dostatečně korozně odolný materiál v prostředí betonu. Její nepřijatelná koroze způsobuje vážná poškození železobetonových konstrukcí, proto se výzkum v oblasti ochrany železobetonových konstrukcí zaměřuje na hledání nových výztužných materiálů. Jedním z alternativních materiálů pro výztuže betonu je pozinkovaná ocel. Žárově a galvanicky pozinkovaná ocel byla exponována v prostředích modelujících pórový roztok čerstvého a zkarbonatovaného betonu. Korozní chování vzorků bez povrchové úpravy, vzorků opatřených fosfátem a chromátem na bázi Cr^{III} i Cr^{VI} v závislosti na obsahu chloridových iontů a pH bylo hodnoceno elektrochemickými zkouškami. Korozní rychlost v prvních dnech expozice je velmi závislá na pH; při pH 13,5 je vysoká i v prostředí bez chloridů. Účinnost fosfátování i chromátování jako protikorozní ochrany je také závislá na pH. Zatímco při pH 12,5 má povlak na bázi Cr^{III} i Cr^{VI} dobré ochranné vlastnosti, při pH 13,5 je účinný pouze chromát s Cr^{VI} .

Degradace historického amalgámového zlacení v interiéru a při atmosférické expozici

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

Na experimentálním materiálu, získaném při restaurování dvou významných historických objektů z amalgámově pozlacené mědi, je prostřednictvím metalografických výbrusů demonstrován proces degradace zlaté vrstvy v atmosférických podmínkách a při expozici v interiéru.

Vrcholová plastika na Čestném sloupu Nejsvětější trojice v Olomouci představuje objekt exponovaný v atmosférických podmínkách, vliv expozice v interiéru byl vyhodnocen na vzorcích z rámu skříňky se soškou Pražského Jezulátka z oltáře sv. Jáchyma a Anny v kostele Panny Marie Vítězné. Zatímco při atmosférické expozici je nejvýznamnějším faktorem degradace zlaté vrstvy korozní napadení podložní mědi, vedoucí ke snížení přilnavosti pozlacení a tvorbě rozsáhlých vrstev krust na povrchu s degradací vzhledu objektu, ve vnitřních podmínkách nebylo prokázáno korozní napadení méně ušlechtilého kovu a k degradaci zlatého povlaku dochází především mechanickým způsobem – otěrem a poškrábáním.

Tepelné zpracování slitin Ti-Si

Autor: Magda Morťaniková
Ročník: 3.
Ústav: kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Dalibor Vojtěch, Ing. Iva Pospíšilová

Slitiny titanu s křemíkem se v porovnání s čistým titanem vyznačují vyšší tvrdostí, pevností a rovněž větší odolností proti vysokoteplotní oxidaci a tečení. Proto jsou perspektivními materiály pro součásti leteckých nebo raketových motorů, které jsou v provozu dlouhodobě tepelně zatěžovány. Informací o mikrostrukturních změnách, ke kterým dochází při tepelném zatížení slitin Ti-Si, však existuje velmi málo. Proto bylo cílem práce popsat vliv tepelné zátěže na změny struktury a mechanických vlastností čistého titanu a slitin TiSi_2 a TiSi_8 . Důraz byl kladen na kinetiku hrubnutí zrn a přítomných intermediárních fází. Pomocí obrazového analyzátoru LUCIA byla u jednotlivých slitin měřena velikost zrna po žhání při teplotě 850°C a po dobu 50, 100, 150 hodin. Také bylo provedeno porovnání tvrdosti uvedených slitin před tepelnou zátěží a po zátěži.

Zvyšování tvrdosti, otěruvzdornosti a chemické odolnosti titanu nitridací

Autor: Michal Novák
Ročník: 2.
Ústav: kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ing. Václava Jahnová

Titan se vyznačuje výborným poměrem pevnosti a hustoty. Pro aplikace, v nichž je vystavován intenzivnímu abrazivnímu namáhání, však nejsou jeho vlastnosti dostačující. Dále titan podléhá oxidaci za vysokých teplot, čímž je omezena maximální teplota pro dlouhodobé použití. Proto jsou hledány metody vytváření vhodných povrchových vrstev s vysokou tvrdostí a s ochranným účinkem proti vysokoteplotní oxidaci. Jednou z možností je nitridace - sycení povrchu materiálu dusíkem. Cílem práce bylo popsat mikrostrukturu a tvrdost vrstev v závislosti na podmínkách nitridace. Vrstva byla připravována metodou nitridace v plynném dusíku při teplotě 1000°C po dobu 6, 9 a 12 h.

Korozní chování mědi v umělých slinách

Autor: Martina Toufarová
Ročník: 2.
Ústav: kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Luděk Joska, CSc.

Měď je biogenním prvkem, tedy prvkem nezbytným pro zdravý vývoj organismů. Pokud je však překročena limitní denní dávka, může působit toxicky. Mnoho dentálních slitin a amalgámů obsahuje tento prvek jako významnou komponentu, vykazující v některých případech nejnižší korozní odolnost. Při expozici in vivo dochází ke korozi fází obsahujících měď a k dávkování jejích korozních produktů do organismu. Studium korozního chování mědi v elektrolytech modelujících dva typy slin ukazuje, že složení prostředí má na její korozní chování výrazný vliv.

Povrchové legování titanu křemíkem za účelem zvýšení oxidační odolnosti

Autor: Barbora Volejníková
Ročník: 2.
Ústav: kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Tomáš Kubatík

Křemík v titanových slitinách přispívá ke zlepšení oxidační odolnosti za vysokých teplot. Jeho zvyšující se obsah může mít, ale negativní vliv na mechanické vlastnosti. Proto se jako účelná jeví příprava povrchových vrstev bohatých křemíkem. Jednou z metod je žíhání titanových vzorků v křemíkovém prášku při vysokých teplotách. Cílem této práce bylo vyhodnocení vlastností křemíkem bohatých povrchových vrstev. Vrstvy byly připravovány žíháním titanu při teplotách 800-1100°C po dobu 3 hodin. Oxidační odolnost křemíkováných vzorků byla hodnocena měřením hmotnostních přírůstků v závislosti na čase oxidace. Dále byla hodnocena mikrostruktura vrstev a měřeny profily mikrotvrdosti.

Studentská vědecká konference 2003

Sekce: MATERIÁLOVÉ INŽENÝRSTVÍ

Ústav inženýrství pevných látek, Ústav chemie pevných látek, 21.11. 2003

Zahájení: 9:00, prostory Ústavu inž. pevných látek, budova B, 3. patro

Komise:

Doc.Ing. Jindřich Leitner, DrSc. - Ústav inženýrství pevných látek (předseda)

Doc.Ing. Petr Macháč, CSc. - Ústav inženýrství pevných látek

(organizační tajemník)

Doc.RNDr. Vladimír Rybka, DrSc. - Ústav inženýrství pevných látek

Doc. RNDr. Josef Stejskal, CSc. – Ústav anorganické chemie

Ing. František Kovanda, CSc. – Ústav chemie pevných látek

Přihlášeno: 6 účastníků

Jana Dobešová

Přemysl Fitl

Kateřina Kolářová

Vladimír Kotál

Jan Mrázek

Marek Prajer

Směsné oxidy vzniklé tepelným rozkladem prekurzorů typu hydrotalcitu obsahujících Co a Mn

Autor: Jana Dobešová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. František Kovanda, CSc.

Sloučeniny typu hydrotalcitu obecného chemického složení $M^{II}_1 \cdot xM^{III}_x(OH)_2(CO_3)_{x/2} \cdot yH_2O$ se často používají jako prekurzory pro přípravu katalyzátorů na bázi směsných oxidů kovů M^{II} a M^{III} . Prekurzory Co-Mn a Co-Mn-Al byly připraveny srážecí reakcí roztoků dusičnanů uvedených kovů s molárním poměrem kationtů $Co:Mn = 4:2$ a $Co:Mn:Al = 4:1:1$ s roztokem Na_2CO_3 a $NaOH$. Srážecí reakce probíhala v průtočném míchaném reaktoru při teplotě $25\text{ }^{\circ}C$ a $pH = 10$. Promyté a vysušené produkty byly kalcinovány 2 hodiny na vzduchu při teplotě $200 - 1100\text{ }^{\circ}C$ a pak ochlazeny na laboratorní teplotu. K charakterizaci připravených vzorků byly použity metody termické analýzy, práškové rentgenové difrakční analýzy, chemické a redoxní analýzy a voltametrie mikročástic. Prekurzor Co-Mn-Al vykazoval difrakční linie typické pro sloučeniny typu hydrotalcitu, krystalinita prekurzoru Co-Mn byla nižší a vrstevnatá struktura hydrotalcitu se pravděpodobně nevytvořila. Oba prekurzory se rozkládají při teplotách do $200\text{ }^{\circ}C$ za vzniku směsných oxidů proměnného složení $Co_xMn_yO_4$ nebo $Co_xMn_yAl_zO_4$ se spinelovou strukturou. Při vysokých teplotách nad $1000\text{ }^{\circ}C$ byl v difraktogramech zjištěn CoO , který krystalizuje jako další fáze společně se spinelem.

Střídavé a stejnosměrné parametry chemických vodivostních senzorů

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

Cílem práce bylo vyvinout pracoviště pro automatizované měření impedance za nízkých frekvencí a zařízení pro automatizované měření VA charakteristik a ověřit funkci při měření chemických vodivostních senzorů. Zařízení pro měření impedancí se skládá z počítačem řízeného generátoru funkcí MOTECH FG-503, operačního zesilovače (v zapojení jako převodník proudu na napětí) a multifunkční měřicí karty PCI-6024E od firmy National Instruments. Jádrem zařízení je PC s programem vytvořeným v prostředí NI Labview 6.0. Zařízení umožňuje měřit impedanci od frekvence 0.02 Hz až po 5000 kHz . Pro analýzu naměřených dat je možné použít program LEVM, který používá algoritmus CNLS (complex nonlinear least squares) a

umožňuje zjistit optimální schémata a hodnoty prvků náhradního obvodu. Pro měření VA charakteristik je použit počítačem řízený zdroj BS575 a mutlimetr M1T380. Obě pracoviště slouží k měření vlastností chemických senzorů (připravených metodou PLD) na bázi anorganických (SnO_2) a organických polovodičů (acetylacetonáty).

Biokompatibilita dotovaného celulózu

Autor: Kateřina Kolářová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Polymerní materiály se často používají v medicínské praxi. Kromě jiných aplikací se studuje i jejich využití jako nosiče při kultivaci kožního krytu pro pacienty s popáleninami. Dotací polymerních nosičů můžeme významně ovlivnit adhezi, proliferaci a rozptřření buněk. Tato práce je zaměřena především na zkoumání změn materiálu, ke kterým dochází v průběhu jeho sterilizace. Studovaným materiálem byl polyethylen (PE) dotovaný 0 – 20 % Ca – derivátu oxycelulózy. Dotované vzorky byly exponovány 1 hodinu při 100 °C ve vodě a následně byly sledovány goniometricky, gravimetricky a mikroskopicky změny v PE. Při sterilizaci těchto vzorků dochází ke dvěma hlavním jevům. K absorpci vody celulózu a vymývání části celulózy. Uvedené změny jsou však velmi malé a proto sterilizace při 100 °C ve vodě nemá zásadní vliv na charakter materiálu a tím na biokompatibilitu dotovaného filmu.

Adheze kovů na polymerní vrstvy

Autor: Vladimír Kotál
Ročník: 4.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Doc. RNDr. Vladimír Rybka, DrSc.

Tato práce je zaměřena na studium možnosti využití UV záření k degradaci polymerních vrstev s cílem zlepšit adhezi kovů na tyto vrstvy. Jako polymerní substrát používám PE (nepolární charakter) a PET (polární charakter) folie. Modifikace polymerů UV zářením je studována v závislosti na době expozice. Polární povaha vrstvy substrátů je ověřována goniometrií. Ukazuje se, že PET folie je degradována mnohem významněji, než PE folie, což lze předpokládat díky přítomnosti benzenového jádra v molekule PETu. Na degradované vrstvy budou dále metodou vakuového napařování a napařování deponovány vrstvy kovů (Ag, Ni, Pd, Pt) a studován jejich charakter, tloušťka a spojitost.

Charakterizace detekčních vrstev vláknově-optických refraktometrických senzorů

Autor: Jan Mrázek
Ročník: 3.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Vlastimil Matějka, CSc. ÚRE AVČR

Princip vláknově-optických refraktometrických senzorů spočívá ve změně indexu lomu v detekčním místě v optickém obalu vlákna, vyvolanou detekovanou chemikálií (analytem). Pro zvýšení citlivosti a selektivity senzorů se vlastnosti detekčního místa modifikují nanesením detekční vrstvy s vhodně zvolenou polaritou a porozitou. Průnikem analytu do vrstvy dochází ke změně indexu lomu a optických ztrát vrstvy, což se projeví změnou šíření světla vrstvou. Tuto změnu lze sledovat pomocí změny výstupního optického výkonu z vlákna. Detekční vrstvy byly tvořeny xerogely připravenými metodou sol-gel z alkoxidů tetraethoxysilanu, methyltriethoxysilanu, fenyltriethoxysilanu. Vrstvy byly nanесeny na polymerem pokrytá křemenná vlákna (PCS) a mikroskopická sklíčka. Homogenita vrstev na sklíčkách byla sledována optickou mikroskopií, tloušťka profilometrem. Vrstvy na vláknech byly charakterizovány měřením úhlových distribucí a časových změn výstupního optického výkonu. Pro zvýšení přenášeného optického výkonu bylo vlákno buzeno

odkloněným kolimovaným svazkem s vlnovou délkou 670 nm. Vrstvy byly v kontaktu s plynnými uhlovodíky, vodou, alkoholy v dusíku. Z naměřených dat byla určena relace mezi polaritou různých vrstev. Výsledky lze použít k odhadu rozdělovacího koeficientu analytu a vrstvy nebo adsorpční izotermy analytu.

Příprava tenkých polymerních vrstev pro optické vlnovody

Autor: Marek Prajer
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Doc. Ing. Ivan Hüttel, DrSc.

Příprava submikronových a mikronových polymerních vrstev polystyrenu (PS) a polymethylmethakrylátu (PMMA) dotovaných permanentními dipóly na bázi organických bivalentních sloučenin boru. Vrstvy jsou připravovány usazováním z roztoku v el. poli, předpokládá se, že dojde k orientaci molekul dipólů rozpuštěných v roztoku do směru el. pole, a že jmenované molekuly si tuto orientaci podrží i ve finální rigidní struktuře tenké vrstvy, což se projeví změnou indexu lomu takové vrstvy oproti vrstvě připravené usazováním z roztoku v nepřítomnosti vnějšího el. pole. Uvedené kompozitní materiály jsou studovány v souvislosti s možností přípravy optických planárních vlnovodů, resp. s možností přípravy takového optického vlnovodu v jednom technologickém cyklu.

Studentská vědecká konference 2003

Sekce: ORGANICKÁ CHEMIE

Ústav organické chemie, 21.11.2003

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

Komise (110):

Doc. Ing. František Hampl, CSc. – předseda

Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Prof. Ing. Ivan Stibor, CSc.

Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

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

+ zástupci sponzorů:

Ing. Rudolf Smrž, CSc. – Synthron, s.r.o.

Ing. Miroslav Havránek, Ph.D. – RE&D VÚFB, a.s.

Ing. Pavel Šebek, CSc. – Zentiva, a.s.

Přihlášeno: 12 účastníků

Václav Dekoj

Martin Havlík

Denisa Hořčicová

Filip Kielar

Anna Kovářová

Martin Kuchař

Aleš Machara

Martin Skalický

Jan Storch

Markéta Šimánová

Tomáš Šmejkal

Roman Zieba

Syntéza a vlastnosti bis-aminokyselin s crownetherovým kruhem

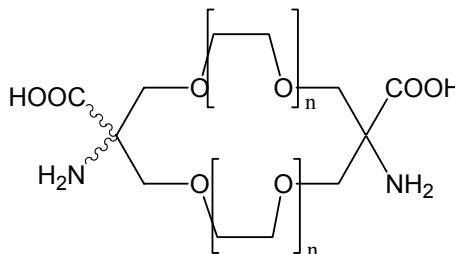
Autor: Václav Dekoj
Ročník: 4.
Ústav: ÚOCHB AV ČR
Školitel: Ing. Martin Bělohradský, CSc.

Prezentace obsahuje popis modulární syntézy bis-aminokyselin, jak je vidíme na obrázku, z *n*(ethylen glykol)-ových jednotek a příslušného oxazolidinového derivátu.

Dále se diskutuje původ *cis-trans*-isomerie aminokyselin a její vztah k zjištěným X-rayovým strukturám krystalů aminokyselin.

Prezentována bude i výroba Cu^{2+} komplexů aminokyselin, které mají přímé využití pro jejich efektivní purifikaci.

Připravené komplexy mají navíc pozoruhodnou X-rayovou strukturu ve vztahu k aminokyselinám, ze kterých byly vyrobeny.



Příprava polyfluorovaných acetylenů

Autor: Martin Havlík
Ročník: 4.
Ústav: organická chemie
Školitel: Ing. Tomáš Bříza, Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Elegantní metodou přípravy substituovaných cyklopentadienů je cyklizace alkynů pomocí komplexu zirkonia. Rozhodl jsem se proto připravit polyfluorované alkyny a využít je pro syntézu polyfluorovaných cyklopentadienů jako prekurzorů pro přípravu fluorofilních ligandů ve fluorových dvoufázových systémech. Jako výchozí suroviny jsem použil perfluoralkyljodid, který jsem radikálově adoval na allylalkohol. Po redukci jsem vzniklý jodalkanol redukoval tributylcínhydridem. Vzniklý alkohol jsem transformoval na odpovídající polyfluorovaný triflát, který je klíčovou látkou pro přípravu polyfluorovaných acetylenů.

Práce byla provedena za podpory grantu GA ČR 110/13/3435

Příprava 2,2'- a 3,3'- biindenu a jejich enantioselektivní hydroborace

Autor: Denisa Hořčicová
Ročník:: 5.
Ústav: organické chemie
Školitel: Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Chirální C_2 -symetrické dioly jsou perspektivní stavební bloky pro syntézu chirálních sloučenin využívaných pro další enantioselektivní transformace jako jsou hydroborace, asymetrické redukce apod. Studovala jsem enantioselektivní hydroboraci 3,3'-biindenu a 2,2'-biindenu pomocí isopinokamfeylboranu vedoucí k chirálním C_2 -symetrickým diolům (1,1'-biindan-2,2'-diolu a 2,2'-biindan-1,1'-diolu). Výchozí alkeny jsem připravila pinakolovým zdvojením indan-1-onu nebo indan-2-onu a jejich následnou dehydratací, 3,3'-biinden je navíc dostupný redukčním zdvojením indenu.

Práce byla provedena za podpory grantu GA ČR 110/13/3435

Deriváty penicillaminu jako potenciálně protinádorové látky

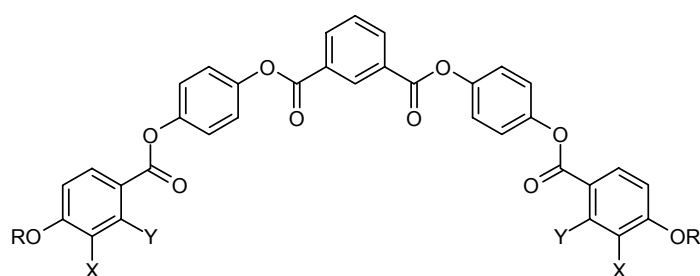
Autor: Filip Kielar
Ročník: 5.
Ústav: organické chemie
Školitel: Prof. Ing. František Liška, CSc.

(D)-Penicillamin (kyselina (S)-2-amino-3-methyl-3-sulfanylbutanová, DPA) je biologicky aktivní látka, s mnoha různými účinky na organismus. Mimo jiné DPA inhibuje růst některých typů nádorů. Tento účinek je připisován především jeho schopnosti inhibovat lysyl-oxidasu, což je enzym katalyzující síťování kolagenu. DPA jej blokuje komplexací měďnatých iontů, kofaktoru tohoto enzymu. DPA však působí na organismus i nepříznivě, proto je nutné jej dávkovat cíleně a jen v nutných množstvích. Jednou z možností je dávkování do místa nádoru v hydrogelu, z něž by byl DPA pomalu vyplavován a působil v potřebném místě. DPA je však příliš hydrofilní a je tudíž příliš rychle z hydrogelu vyplavován a odnášen pryč. Cílem této práce je proto připravit funkční deriváty DPA (estery, amidy), které budou lipofilnější a zachovají si volné amino a sulfanilové skupiny pro komplexaci měďnatých iontů.

Syntéza nových kapalných krystalů vycházející z kyseliny isoftalové

Autor : Anna Kovářová
Ročník : 4.
Ústav : organické chemie
Školitel : Ing. Václav Kozmík, CSc.

V této práci byla připravena řada nových kapalných krystalů banánového tvaru, kde centrálním jádrem je isoftalová kyselina. Syntéza vychází z isoftaloyldichloridu, z něhož byly sledem reakcí připraveny konečné cílové oligoestery. V první sérii byla měněna délka alkylového řetězce R na obou ramenech molekuly. Ve druhé sérii byl obměňován substituent v jádře postranního řetězce. V obou případech sledujeme vliv rozdílných substituentů na koncovém aromatickém systému na fyzikální vlastnosti syntetizovaných molekul.



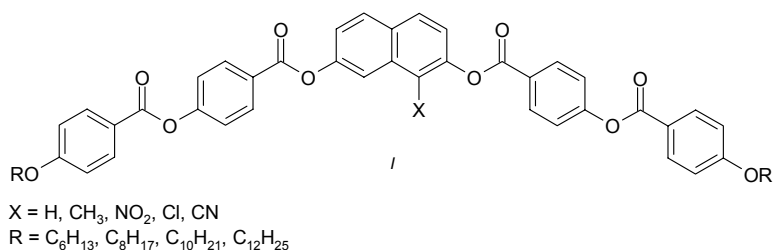
Série 1 : X = Y = H, pro: 1a: R = C₆H₁₃
1b: R = C₈H₁₇
1c: R = C₁₀H₂₁
1d: R = C₁₂H₂₅

Série 2 : R = C₁₀H₂₁, pro: 2a: X = H, Y = F
2b: X = F, Y = H
2c: X = Br, Y = H
2d: X = OCH₃, Y = H

Kapalné krystaly banánového tvaru odvozené od substituovaných 2,7-dihydroxynaftalenů

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

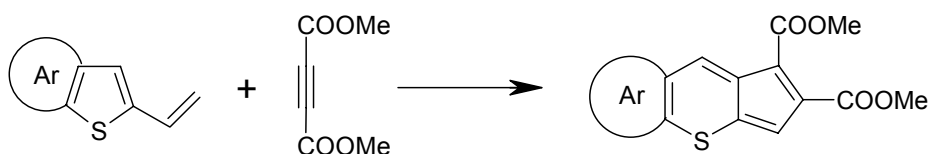
V rámci výzkumu nových kapalných krystalů banánového typu byla vypracována metodika syntézy 1-substituovaných 2,7-dihydroxynaftalenů a 4(4'-alkyloxybenzen-1'-karbonyloxy)benzoových kyselin. Z těchto prekurzorů bylo připraveno 20 nových kapalně krystalických látek obecného vzorce (I). U těchto látek bylo studováno mesomorfní chování v závislosti na substituci centrálního jádra a na délce koncových alkoxylových skupin. Výsledky jsou použity pro návrh dalších mesogenních struktur.



Studium Dielsových-Alderových reakcí kondenzovaných 2-vinylthiofenů

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

Studium reaktivity 2-vinylthieno[3,2-*b*][1]benzothiofenu a 2-vinylthieno[3,2-*b*]thiofenu v cyklizační reakci s dimethyl-butyndioátem (DMAD) vedlo k širokému spektru produktů včetně kondenzovaných thialenů. Jejich vznik si vysvětlujeme jako důsledek nesynchronního procesu cyklizační reakce následované dosud nepopsaným přesmykem. Širší studie ukázala, že analogický průběh mají i cyklizační reakce 2-vinyl[1]benzothiofenu a 2-vinylthiofenu.



Rozšířená studie diskutuje průběh reakce, vznik jednotlivých produktů a navrhuje mechanismus celého cyklizačního procesu.

Studium fluorhalomethylačních reakcí

Autor: Martin Skalický
Ročník: 5.
Ústav: organické chemie
Školitel: Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

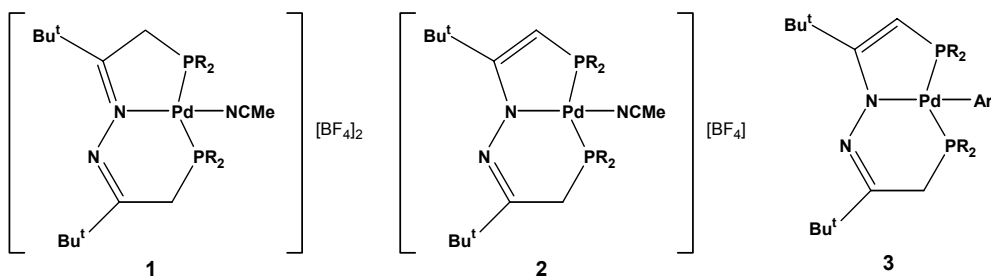
Ve své práci se zabývám studiem reakcí, při nichž dochází k přenosu substituované mono-, di- nebo trifluormethylové skupiny. Pomocí vysoce reaktivního Riekeho hořčíku jsem připravil Grignardova činidla z trifluorjodmethanu, chlórdibromfluormethanu a 1,2-dibrom-1,1,2,2-tetrafluorethanu a následně provedl jejich reakce s různými elektrofilny. Pokusil jsem se také o přípravu Grignardových činidel z bromdifluormethylsilanů, kde by měla přítomnost silylové skupiny stabilizovat vznikající organokovy.

V teoretické části jsem pokračoval ve studiu mechanismu nukleofilní di- a trifluormethylace, probíhajících za katalýzy fluoridovým iontem. Zaměřil jsem se na modelování přenosu aniontu na karbonylovou skupinu formaldehydu. Porovnáním energií získaných reakčních cest a tranzitních stavů jsem potvrdil větší náročnost provedení difluormethylace, což je v souladu s experimenty.

Aryl-amidové, hydridové a kationtové komplexy palladia s difosfinoaziny, využití v homogenní katalýze

Autor: Jan Storch
Ročník: 5.
Ústav: organické chemie
Školitel: Doc.Ing.D.Dvořák, CSc, Ing.J.Čermák, CSc

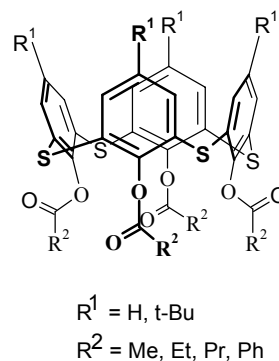
Nedávno jsme připravili kationtové difosfinoazinové komplexy palladia a jejich deprotonací en-hydrazonové chloro komplexy. Jejich chemie byla nyní rozšířena o acetonitrilové kationtové komplexy **1** a **2**, které jsou testovány jako hydroaminační katalyzátory. Dále jsme studovali hydridové komplexy, které budou využity v inzerčních reakcích pro přípravu alkenových komplexů a jako potenciální katalyzátory Heckovy reakce. Provedli jsme pokusy o katalýzu Heckovy reakce s využitím chloro komplexů. Budou diskutovány dva různé přístupy pro syntézu aryl-amidových komplexů **3** jako potenciálních katalyzátorů Heckovy reakce, ve kterých je arylem fenyl, o-tolyl nebo 2,6-dimethylfenyl.



Acylace spodního okraje thiacalix[4]arenů

Autor: Markéta Šimánová
Ročník: 5.
Ústav: organická chemie
Školitel: Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

V rámci systematického studia reaktivity thiacalix[4]arenů byla provedena série acylačních reakcí dolního okraje molekuly. Reakce byly provedeny nejen na základním tetra-*tert*-butylthiacalix[4]arenu, ale i na „de-*tert*-butylovaném“ thiacalix[4]arenovém skeletu. Syntéza se soustředila na acetyl, propionyl, butanoyl, benzoyl a tosyl deriváty. Nezbytnou součástí syntézy, pro přípravu cílených derivátů, byla optimalizace reakčních podmínek a činidel. Struktura získaných acylderivátů byla charakterizována pomocí ¹H NMR a v některých případech pomocí rentgenostrukturní analýzy. Pokračováním výzkumu bude derivatizace charakterizovaných tetraacylderivátů thiacalix[4]arenů.

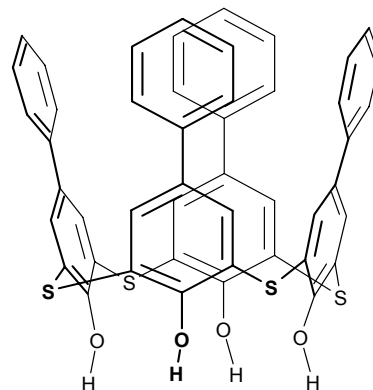


Syntéza thiacalix[4]arenů s rozšířenou kavitou

Autor: Tomáš Šmejkal
Ročník: 4.
Ústav: organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Tato práce se zabývá přípravou 5,11,17,23-tetrafenylthia-calix[4]arenu kondenzační reakcí bifenylyl-4-olu se sírou. Produkt reakce představuje nový thiacalixarenový derivát s hlubokou aromatickou kavitou.

Alkylace spodního okraje thiacalixarenového skeletu vede k tetraalkylovaným derivátům, jejichž konformační preference byly studovány pomocí ^1H NMR spektroskopie a rentgenostrukturní analýzy. Zatímco tetramethoxy a ethoxy deriváty jsou konformačně mobilní (termodynamická směs konformerů v roztoku CDCl_3), připravené tetrapropoxy deriváty jsou za pokojové teploty neomezeně stálé.

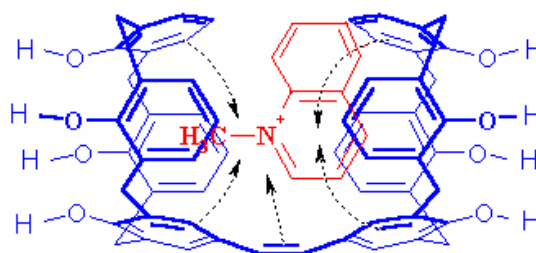


Využití McMurryho reakce pro přípravu rigidních struktur na bázi calixarenu a thiacalixarenu

Autor: Roman Zieba
Ročník: 5.
Ústav: organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Pavel Lhoták CSc.

McMurryho reakcí karbonylových derivátů calixarenu a thiacalixarenu byly připraveny struktury vzniklé intramolekulární nebo intermolekulární tvorbou dvojné vazby. Příkladem je dimer, tvořený dvěma jednotkami calixarenu, spojenými přes horní okraj, jehož struktura byla prokázána pomocí NMR a hmotnostní spektrometrie.

Byla provedena NMR titrace *N*-methylchinolinium jodidem ke zjištění jeho schopnosti komplexace amoniových solí. Byl připraven také derivát thiacalixarenu, nesoucí na svém spodním okraji stilbenovou jednotku navázanou na protilehlá benzenová jádra, který je analogem „nesírného derivátu“, majícího schopnost komplexovat neutrální molekuly s polarizovanou C-H vazbou.



Studentská vědecká konference 2003

Sekce: ORGANICKÁ TECHNOLOGIE I ORGANICKÁ TECHNOLOGIE II

Ústav organické technologie, 21.11.2003
Zahájení v 9:00 hodin, budova A, posluchárna A01

Komise (ústav 111):

předseda: Prof. Ing. J. Hanika, DrSc.
členové: Doc. Ing. B. Dvořák, CSc.
Doc. Ing. Z. Bělohlav, CSc.
Doc. Ing. V. Tukač, CSc.
Doc. Dr. Ing. P. Klusoň
Ing. L. Kurc, CSc.
Ing. J. Krupka
tajemník: Ing. P. Zámotný, PhD

Přihlášeno: 17 účastníků

5. ročník:	vedoucí:
BŘENKOVÁ Lucie	Prof. Hanika
ČIHAŘOVÁ Renata	Prof. Hanika
DROBEK Martin	Doc. Klusoň
DUDKOVÁ Iva	Doc. Dvořák
HAERINGOVÁ Petra	Prof. Červený
KOPŘIVOVÁ Klára	Ing. Kačer
MATĚJOVÁ Lenka	Prof. Horák
PATERA Jan	Ing. Krupka
PAVLAČKOVÁ Zuzana	Ing. Petrisko
ROHLÍK Václav	Doc. Tukač
ŠIMÍČKOVÁ Martina	Doc. Tukač
VOJTOVÁ Daniela	Doc. Bělohlav

4.ročník:	
KARHÁNEK David	Ing. Kačer
MELEZÍNKOVÁ Lenka	Ing. Petrisko
STARKBAUMOVÁ Lucie	

3. ročník:
HRÁDEL Jiří
KALČÍKOVÁ Jana

Citlivostní analýza procesu mokré granulace léčiv

Autor: Lucie Břenková
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc., Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Cílem práce bylo zhodnotit vliv distribuce velikosti a tvaru částic účinných látek, množství vody a počáteční teploty vsádky na dobu granulace, nárůst teploty během granulace, na sypnou hustotu granulátu a na konečný příkon hlavního míchadla. Vlastnosti účinných látek byly hodnoceny síťovou analýzou, sypnou a setřesnou hustotou. Experimenty probíhaly v provozním a poloprovozním granulátoru v a. s. Zentiva – Léčiva. Analýzou experimentálních dat bylo zjištěno, že na průběh granulace má rozhodující vliv velikost krystalů účinné látky, množství přidávané vody a počáteční teplota vsádky. V souvislosti s tímto závěrem byly analyzovány vlastnosti účinných látek ještě před naplněním granulátoru, přímo ve skladovacích sudech. Bylo zjištěno, že v některých sudech jsou výrazné rozdíly v distribuci velikosti částic účinné látky nejen v různých, ale i ve stejných výrobních šaržích. V souladu s výsledky citlivostní analýzy lze proto různou distribuci velikosti částic účinných látek označit za pravděpodobně hlavní příčinu nežádoucího kolísání doby granulace a tím i různého nárůstu teploty vsádky v provozních podmínkách.

Studium chování zkrápěných reaktorů s pevným katalytickým ložem a vliv periodického nástřiku na jejich výkon

Autor: Renata Čihařová
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc.

Třífázový zkrápěný reaktor bývá většinou provozován v režimu filmového toku, přičemž kapalina stéká po vrstvě katalyzátoru ve formě laminárního filmu. Kontakt plynné a kapalné fáze je při tomto režimu nedostatečný a z tohoto důvodu je rychlost chemické reakce určena odporem přenosu tepla a hmoty. Periodickým dávkováním kapalné směsi do reaktoru můžeme ovlivnit režim, ve kterém reakce probíhá a současně může dojít k ovlivnění výkonu reaktoru. Výhodou změny režimu filmového toku na pulsní režim je intenzivnější přenos tepla a hmoty mezi fázemi a tím i dosažení zvýšení výkonu reaktoru.

Úkolem studie je sestavení matematického modelu popisujícího chování zkrápěného reaktoru řízeného periodickým zvyšováním průtoku kapalné fáze. Model je založen na výzkumu a datech, která byla získána na Politecnico di Torino v Itálii.

Stereoselektivní hydrogenace methyl 3 - oxobutyrátu za použití enantioselektivních katalyzátorů na bázi Ru – BINAP chirálních komplexů

Autor: Martin Drobek
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: doc. Dr. Ing. Petr Klusoň

Práce se zabývá problematikou hydrogenace ketonických látek (methyl 3 – oxobutyrátu) na alkohol (methyl 3 – hydroxybutyrát) s definovanou absolutní *R* nebo *S* konfigurací na asymetrickém uhlíku. K tomuto účelu byl použit homogenní katalyzátor [2,2'-bis(difenylfosfino) – 1,1'-binaftyl] chloro (p-cymen) ruthenium chlorid. Důraz byl kladen především na studium stability a aktivity komplexu při jeho syntéze i následné hydrogenaci v závislosti na reakčních podmínkách (teplota, tlak). Dále bylo provedeno testování citlivosti komplexu k deaktivacím vlivům vody a kyslíku. Hydrogenace byly provedeny za tlaku 5 MPa a teploty 50°C v homogenní fázi a bylo dosaženo optické čistoty produktu kolem 95%. Rovněž byla studována stabilita imobilizovaného komplexu v systému nosič – heteropolykyselina ($\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$) – komplex. Bylo zjištěno, že zachycení na aktivním uhlí je účinnější než zachycování komplexu na oxidických nosičích jako jsou TiO_2 nebo $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$.

Katalyzátor pro hydrogenaci methylesterů mastných kyselin.

Autor: Iva Dudková
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Hydrogenace methylesterů mastných kyselin je důležitým, v průmyslové praxi realizovaným procesem na výrobu mastných alkoholů. Tento proces je urychlován Cu-, Ni-, nebo Cu-Zn katalyzátory, nejčastěji však tzv. Adkinsovým, měďnatochromitým katalyzátorem. Lineární mastné alkoholy C_{12} – C_{18} jsou surovinovou základnou pro syntézu povrchově aktivních látek, tenzidů. Jedním z problémů heterogenně katalyzované hydrogenace, technologicky realizované v suspenzních i zkráplených reaktorech, je rozpouštění kovové mědi kyselými reakčními meziprodukty. Úkolem této úvodní studie bylo:

- vyzkoušet funkčnost a reprodukovatelnost převzaté experimentální metodiky na měření rozpustnosti měďnaté složky v katalyzátorech,
- porovnat rozpustnost Cu^{2+} složky CuCr_2O_4 katalyzátoru N201 japonské fy NIKKY CHEM.CO., Ltd. s uvedenou vlastností původních, cíleně modifikovaných a v tuzemsku vyráběných Cu-katalyzátorů.

Bylo zjištěno, že reprodukovatelnost užití metodiky je lepší než 4 rel.%. Naměřené výsledky ukázaly, že metodika umožňuje spolehlivé rozlišení rezistence Cu^{2+} , dispergované v jednotlivých katalyzátorech, vůči rozpouštění v 10% kyselině octové. Rozpustnost Cu^{2+} vzorku tuzemského katalyzátoru ESR 491 P fy Eurosupport Manufacturing Czechia, s.r.o. je poloviční v porovnání se vzorkem katalyzátoru Adkinsova typu.

Příprava Cetonalu - vonné látky na bázi iononů

Autor: Petra Haeringová
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Práce se zabývá studiem hydrogenace 2-methyl-4-(2,6,6-trimethylcyklohex-1-enyl)-but-2-enalu na 2-methyl-4-(2,4,4-trimethylcyklohex-1-enyl)-butyraldehyd, komerčně nazývaný Cetonal. Cílem práce bylo nalezení optimálních podmínek uvedené regioselektivní hydrogenace pro přípravu Cetonalu s vhodnými senzoryckými vlastnostmi. Hlavní pozornost byla věnována posouzení vlivu typu katalyzátoru (Pd/C, Pt/C, Ni/Al₂O₃, Raney-Ni), vlivu teploty (20 - 180 °C) a tlaku vodíku (0,1 - 8 MPa). Značná pozornost byla rovněž věnována vlivu typu rozpouštědla a poměru rozpouštědlo : substrát, jelikož tyto parametry měly zásadní vliv na reaktivitu a selektivitu výše uvedené reakce. Následující parametry byly shledány optimálními podmínkami technologie: katalyzátor Ni/Al₂O₃, teplota 120 °C, tlak 6 MPa, poměr rozpouštědlo : substrát = 20 : 80. Analytický výtěžek reakce činí cca 85 %, čistota produktu je 97 %. Na základě uvedených optimalizačních experimentů byl navržen pracovní postup pro poloprovozní testy v současné době realizované v podniku Aroma Praha.

Laboratorní pyrolýza cykloalkanů

Autor: Martin Hrádel
Ročník: 3.
Ústav: organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Pyrolýzní duální plynová chromatografie byla využita ke studiu chování nejdůležitějších cykloalkanů v primárních benzinech – cyklopentanu a cyklohexanu. Testována byla pyrolýza samotných cykloalkanů i jejich směsí s typickým primárním benzinem (25, 50 a 75 hm. %). Z výsledků laboratorních pokusů vyplynulo, že pyrolýza cykloalkanů ve směsi s benzinem vede k výrazně odlišným výtěžkům hlavních pyrolýzních produktů v porovnání s pyrolýzou individuálních uhlovodíků. Příčinou změny chování je odlišný mechanismus pyrolýzy především ve fázi propagace radikálových řetězců. Odvozené přibližné mechanismy pyrolýzních reakcí testovaných cykloalkanů byly zároveň konfrontovány s publikovanými, často zcela protichůdnými hypotézami o chování cykloalkanů během jejich pyrolýzy.

Matematické modelování mokré granulace léčiv

Autor: Jana Kalčíková
Ročník: 3.
Ústav: organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Mokrá granulace léčiv je jedním ze základních procesů výroby pevných lékových forem. Kromě výsledků experimentů a údajů z provozních listů lze k optimalizaci provozu míchaných granulátorů využít výsledky simulací s matematickými modely. Pro simulační výpočty byly navrženy dva modely – ryze empirický model a semimechanistický model provozního resp. poloprovozního granulátoru. Empirický model je určen k predikci provozních parametrů (doba granulace, teplotní nárůst vsádky, sypná hustota granulátu) v závislosti na kvalitě granulované směsi (sypná a setřesná hustota suroviny, množství vody) a počáteční teplotě granulace. Semimechanistický model je využíván k přenosu dat z poloprovozního granulátoru do provozních podmínek. Empirický model představuje umělá neuronová síť, semimechanistický model obsahuje podrobný popis tvorby a rozpadu granulí v ideálně míchané nádobě s výměnou tepla do okolí. Identifikace parametrů obou modelů vychází z výsledků poloprovozních a provozních experimentů v a .s. Zentiva – Léčiva.

Pt(0) komplexy jako modelové látky pro studium elektronických vlivů při katalytických hydrogenacích

Autor: David Karhánek
Ročník: 4.
Ústav: organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer PhD.; Ing. Marek Kuzma;

Práce se zabývá studiem komplexů typu $(\text{Ph}_3\text{P})_2\text{Pt}(0)$ -olefin, resp. studiem elektronických vlivů substituentů R vázaných v olefinu $\text{CH}_2=\text{CH-R}$ na pevnost vazeb $(\eta^2\text{-olefin})\text{-Pt}(0)$. Ta je kvantitativně posuzována pomocí výpočtů chemického posunu ^{13}C a ^1H v prostředí Gaussian® 98W a porovnána s experimentálním měřením NMR chemických posunů. Výsledky jsou následně využity k vyjádření korelace mezi strukturou olefinu a stabilitou adsorbovaného komplexu s „homogenním katalyzátorem“ $(\text{Ph}_3\text{P})_2\text{Pt}(0)$, případně heterogenním Pt-katalyzátorem, jehož povrch nelze jednoznačně modelovat a jsou pro něj k dispozici hodnoty relativních adsorptivit získané z hydrogenačních kinetických experimentů.

Pro teoretické výpočty geometrií jednotlivých molekul i predikci NMR parametrů byly použity metody DFT (*Density Functional Theory*) s vhodně zvolenými parametrizacemi od 6-31G(d) až 6-311G**(d) pro lehčí prvky (P, O, C, H) a dále LANL2DZ, která s dostatečnou přesností popisuje koordinační sféru pro atom platiny. Výsledky jsou prezentovány ve formě změn hybridizace a řádu vazby C=C po interakci s homogenním resp. heterogenním katalyzátorem.

Enantioselektivní hydrogenace biacetylu na heterogenním cinchonidinem modifikovaném platinovém katalyzátoru

Autor: Klára Kopřivová
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: Ing. Jana Šplíchalová

Práce se zabývá problematikou enantioselektivní hydrogenace vicinálního diketonu – biacetylu (butan-2,3-dion) na nosičovém platinovém katalyzátoru modifikovaném cinchonidinem. Pozornost byla věnována porovnání způsobů modifikace katalyzátoru cinchonidinem za přítomnosti kyslíku - aerobní *in situ* a aerobní *ex situ* modifikace. Vlastní enantioselektivní hydrogenace byla studována s cílem posouzení vlivu vybraných reakčních parametrů - tlaku, teploty, typu rozpouštědla a poměru katalyzátoru a modifikátoru na enantioselektivní průběh hydrogenace resp. na kinetické parametry - reakční rychlost a enantioselektivitu (ee). Bylo zjištěno, že poměrně vysokých enantioselektivních výtěžků (ee > 40 %) bylo dosaženo při způsobu modifikace aerobní *in situ*, reakční teplotě 0 °C a tlaku 5 MPa. Poměr katalyzátoru a modifikátoru měl významný vliv na rychlost hydrogenace, zatímco vliv na enantioselektivní výtěžek byl téměř zanedbatelný (optimální poměr 2:1).

Matematický model kalorimetrického čidla pro identifikaci aktuální reaktivity směsi při exotermní reakci v režimu on-line

Autor: Lenka Matějová
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Josef Horák, DrSc.

Včasné rozpoznání nebezpečného stavu reaktoru je podmínkou bezpečného řízení. Jednou z příčin tzv. ujetí teploty ve vsádkovém reaktoru při exotermní reakci je příliš vysoká reaktivita reakční směsi. Úkolem studie bylo navrhnout adiabatické kalorimetrické čidlo umožňující vyhodnotit aktuální reaktivitu reakční směsi v režimu on-line. Kalorimetrické čidlo je nádoba, jejíž stěny jsou zhotoveny z materiálu s nízkou tepelnou vodivostí, v níž je senzor na měření teploty. Čidlo je umístěno v reakční směsi v chemickém reaktoru. Při určení reaktivity je čidlo ve zvoleném čase naplněno reakční směsí a uzavřeno.

K určení reakčních podmínek, za kterých je možné spolehlivě vyhodnotit aktuální reaktivitu směsi zpracováním údajů o průběhu teploty reakční směsi uvnitř čidla a v reaktoru, byl vytvořen simulační model reaktoru a čidla. Model byl odvozen pro reakci nultého řádu za předpokladu, že obsah reaktoru i čidla je dokonale promícháván, a že teplota v teplosměnném systému reaktoru je řízenou veličinou. K numerickému řešení diferenciálních rovnic byl vypracován software v programovacím jazyku MATLAB.

Hydrogenace nitrilů v přítomnosti primárních aminů

Autor: Lenka Melezínková
Ročník: 4
Ústav: organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Krupka

Hydrogenace nitrilů patří k významným metodám průmyslové přípravy řady důležitých aminů. Tato práce je součástí širší teoretické studie, jejímž cílem je rozšíření dosavadních poznatků o kinetice a mechanismu hydrogenace nitrilů. Předkládaná práce je věnována hydrogenaci nitrilů $R^1-C\equiv N$ v přítomnosti primárního aminu $R^2-CH_2-NH_2$ s alkylem odlišným od alkylu výchozího nitrilu. Na modelových reakčních systémech byl sledován vliv reakčních podmínek, struktury reaktantů a typu katalyzátoru na selektivitu reakce v kapalné fázi. Selektivita byla posuzována jednak z hlediska míry participování přidaného aminu na tvorbě sekundárních, resp. i terciárních aminů, a jednak z hlediska celkové tvorby vyšších (sek. a terc.) aminů. Mezi zajímavé výsledky práce patří i zjištění, že při hydrogenacích katalyzovaných Ni nebo Co obsahují reakční směsi v nezanedbatelných koncentracích i sekundární amin $R^2-CH_2-NH-CH_2-R^2$, jenž má oba alkylы shodné s alkylem přidaného aminu. V případě, že katalyzátorem byl Pd nebo Pt, nebyl tento amin detekován. Chemismus vzniku tohoto aminu byl diskutován.

Selektivita hydrogenací nesymetrických sekundárních aldiminů

Autor: Jan Patera
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Krupka

Práce se zabývá studiem hydrogenace nesymetrických sekundárních aldiminů, zejména pak vztahem mezi hydrogenačním katalyzátorem a tvorbou neobvyklých vedlejších produktů. Bylo zjištěno, že zatímco Pd a Pt katalyzátory vykazují pro hydrogenaci aldiminů typu $R^1-CH=N-CH_2-R^2$ vysokou selektivitu na příslušný amin $R^1-CH_2-NH-CH_2-R^2$, selektivita Ni a Co katalyzátorů je značně nižší. Za katalýzy Ni a Co jsou dominantními složkami v hydrogenátu vedle $R^1-CH_2-NH-CH_2-R^2$ též symetrické aminy $R^1-CH_2-NH-CH_2-R^1$ a $R^2-CH_2-NH-CH_2-R^2$. V průběhu hydrogenace pak obsahují reakční směsi rovněž $R^1-CH=N-CH_2-R^1$, $R^2-CH=N-CH_2-R^2$ a $R^2-CH=N-CH_2-R^1$. Vznik těchto vedlejších produktů jsme vysvětlili migrací dvojné vazby kolem dusíkového atomu v molekule iminu $R^1-CH=N-CH_2-R^2$. K uvedené migraci dochází na Ni a Co katalyzátorech, a to výhradně za podmínek katalytické hydrogenace.

Cyklizace ethylendiaminu na zeolitovém katalyzátoru

Autor: Zuzana Pavlačková
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: Ing. Miroslav Petrisko, CSc., Ing. Jiří Trejbal

Byly studovány cyklizační reakce ethylendiaminu na kyselém heterogenním katalyzátoru ZSM-5 při reakci v plynné fázi při teplotě 340 – 360 °C. Při těchto podmínkách probíhají substituční i eliminační reakce. V reakční směsi byly identifikovány látky jako piperazin, pyrazin a jejich deriváty, 1,4-diaza-bicyklo[2,2,2]oktan, ethylamin a další. Byly provedeny experimenty na katalyzátorech ZSM-5 s moduly 40, 45, 120, 200 (poměr prvků Si/Al). Substituční reakce vykazovaly maximum při použití katalyzátoru s modulem 120. Na katalyzátoru s modulem 40 byl zkoumán vliv molárního poměru amoniak : voda : ethylendiamin při konstantním celkovém molárním toku reaktorem. Bylo zjištěno, že s rostoucím obsahem vody v nástrihu vzrostl rozsah substitučních reakcí. Dále byl testován vliv amoniaku a dusíku použitých jako hnací plyny při konstantní koncentraci vody. Při poměru ethylendiamin : amoniak – 1 : 1 bylo zjištěno, že proběhly substituční reakce ve větší míře než při molárním poměru 1 : 5. Při použití dusíku jako hnacího plynu byly preferovány eliminační reakce.

Čištění odpadního vzduchu z extrudéru

Autor: Václav Rohlík
Ročník: 5.
Ústav: ÚOT (vypracováno na HTWK Leipzig – Energietechnik, SRN)
Školitel: Dipl.- Ing. Karl – Heinz Dorn (HTWK Leipzig)

Při polymerizaci methal-methacrylatu (MMA) na polyethylen-methacrylat (PMMA) se jako iniciátor polymerizace používá 2,2'- azoisobutyronitril (AIBN), který se ale asi z jedné poloviny rozkládá na tetramethylsuccinonitril (TMSN), který je prudce jedovatý, proto se musí ze směsi odstraňovat absorbcí do vhodného rozpouštědla.

Cílem této práce byla charakteristika rozpustností 5 různých pevných vzorků v různých rozpouštědlech s rozdílnou polaritou. Vzorky pocházely od firmy Barlo Plastics GmbH při separaci ze vzduchu v extrudéru při zpracování polymeru PMMA a polycarbonatu (PC) ve vakuu extrudéru. Pokusy se prováděly při teplotách 20°C, 40°C, 60°C a 80°C a porovnával se čas, za který se vzorky rozpustily. Na závěr byla zhotovena finanční analýza, kde se porovnávala rozpustnost, ztráta rozpouštědla při práci ve vakuu a cena. Jako nejlepší kompromis těchto vlastností se ukázalo průmyslové rozpouštědlo Genosorb 1843 při pracovní teplotě 45 °C.

Laboratorní pyrolýza zbytkové frakce C9

Autor: Lucie Starkbaumová
Ročník: 4.
Ústav: organické technologie
Školitel: Ing. Petr Zámotný Ph.D.

Ethylenová pyrolýza poskytuje širokou paletu produktů. Některé uhlovodíkové frakce jsou na trhu velmi obtížně uplatnitelné a alternativou k jejich spalování nebo nevýhodnému prodeji může být vrácení těchto produktů zpět do pyrolýzy, zpravidla formou kopyrolýzy recyklovaného proudu s vhodnou základní surovinou. Příkladem frakce, která se na pyrolýzní jednotce v Chemopetrolu Litvínov a.s. recykluje, je tzv. zbytková frakce C9 (ZC9), tvořená převážně substituovanými aromatickými a vícenenasycenými polycyklickými uhlovodíky.

Laboratorní pyrolýzu je možno využít k hodnocení výtěžků důležitých produktů. Ačkoliv výtěžky produktů neodpovídají zcela přesně výtěžkům dosaženým v provozním reaktoru, lze je dobře použít k relativnímu porovnání jednotlivých surovin. Laboratorní pyrolýzou byly otestovány vzorky surové ZC9 a produktů její selektivní hydrogenace. Zároveň byly s využitím GCMS identifikovány hlavní složky ZC9. Vliv jednotlivých složek ZC9 na celkové výtěžky pyrolýzy byl diskutován na základě výtěžků pyrolýzy cílených destilačních řezů ZC9.

Katalytické krakování olefinů

Autor: Martina Šimíčková
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: Doc. Ing. V. Tukač, CSc.

S rostoucí poptávkou po propylenu a snahou o hlubší využití ropných surovin se pozornost zaměřuje na využití $C_4 - C_6$ frakcí pro výrobu propylenu a ethylenu. Štěpení vazeb C – C slouží ke zpracovávání výševroucích ropných frakcí zejména výševroucích olejů a mazutu. Katalytické krakování je endotermní proces probíhající na kyselém katalyzátoru přes tvorbu karboniového iontu, která je rychlost určujícím krokem procesu. Současně může probíhat řada izomeračních reakcí, které jsou ovlivněny chemickou rovnováhou.

Cílem této práce je vyhodnotit experimentální testování krakovacích katalyzátorů provedené na výzkumné jednotce v Chemopetrolu Litvínov s modelovou látkou 1-hexenem, za tlaku 150 kPa a v rozmezí teplot 450 – 500°C. Pomocí programu Aspen Plus byla vytvořena počítačová simulace daného procesu. Model krakování zahrnoval průtočný ideálně míchaný katalytický reaktor, pro popis probíhajících chemických reakcí bylo užito zjednodušené reakční schéma se zástupnými látkami. Nelineární regresí byly identifikovány kinetické parametry modelu a s využitím databáze programu byly spočteny termodynamické rovnovážné konstanty a složení rovnovážných reakcí. Nejvýznamnější výsledky byly srovnány s experimentálně zjištěnými hodnotami pro řady dat stanovené pro dva různé katalyzátory.

Využití pyrolýzní plynové chromatografie k hodnocení surovin ethylenové pyrolýzy

Autor: Daniela Vojtová
Ročník: 5.
Ústav: organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc., Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Častým úkolem provozní ethylenové pyrolýzy je hodnocení kvality benzinů, atmosférických plynových olejů a destilačních zbytků z hydrokrakování z hlediska výtěžků žádaných produktů. Je proto zkoumána možnost hodnocení surovin pyrolýzou v laboratorním reaktoru spojená s následnou transformací získaných dat do provozních podmínek.

V pyrolýzním mikroreaktoru plynového duálního chromatografu bylo pyrolyzováno přibližně 25 vzorků surovin, které byly současně pyrolyzovány na průmyslových reaktorech typu SRTIII a GK 6 při experimentech v Chemopetrolu Litvínov.

Pro přenos dat z laboratorního reaktoru do provozních podmínek byla použita umělá neuronová síť. Vstupy neuronové sítě byly zastoupeny 15 parametry: specifickým zatížením provozních reaktorů, ředícím poměrem pára/surovina, výstupní a výstupní teplotou reakční směsi na vlásenkách typu GK 6 a SRT III, dále indexem BMCI pyrolyzovaných surovin a laboratorními výtěžky 10 nejdůležitějších produktů pyrolýzy. Jako optimální se ukázala třívrstvá dopředná neuronová síť se dvěmi skrytými vrstvami neuronů.