

Studentská vědecká konference na Fakultě chemické technologie

Seznam sekcí

Organická chemie I

Organická chemie II

Organická technologie

Anorganická chemie

Anorganická technologie

Anorganické nekovové materiály I

Anorganické nekovové materiály II

Kovové materiály

Chemie a technologie polymerů

Materiálové inženýrství

VŠCHT Praha

ORGANICKÁ CHEMIE I

Komise (ústav 110):

Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc. - předseda

Ing. Radek Cibulka, Ph.D. - organizační tajemník

Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Ing. Alexandra Šilhánková, CSc.

Doc. Ing. Karel Ulbrich, DrSc. (ÚMCH AV ČR)

Ing. Pavel Šebek, CSc. (Léčiva, a.s.)

RNDr. Karel Dobrovský, CSc. (Re&d VÚFB. a.s.)

Přihlášeno: 9 účastníků

Martin Káš

Filip Kielar

Michala Kozáková

Jiří Rybáček

Markéta Skalická

Jan Štambaský

Jan Storch

Pavel Tužina

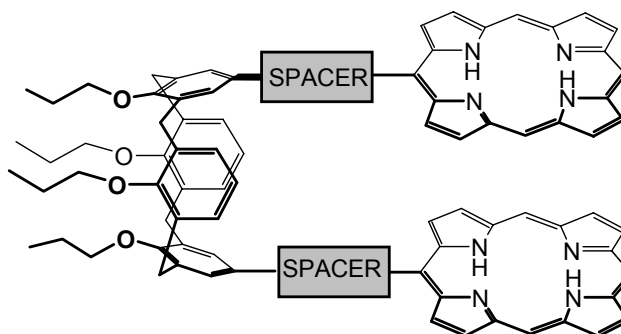
Roman Zieba

Syntéza nových calixarenporfyrinů a studium jejich komplexačních vlastností

Autor : Martin Káš
Ročník: 5.
Ústav : organické chemie
Školitel : Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Tato práce se zabývá přípravou a studiem komplexačních vlastností nových calixarenoporfyrinových derivátů.

Při studiu konjugátů calix[4]arenů a thiacalix[4]arenů s porfyriny byla objevena jejich schopnost komplexovat fullereny C₆₀ a C₇₀. Za interakce způsobující komplexaci fullerenu jsou odpovědné porfyrinové jednotky těchto konjugátů, zatímco calixarenový skelet slouží jako vhodné „molekulární lešení“ umožňující preorganizaci prostorového uspořádání molekuly. Sledován byl vliv tohoto prostorového uspořádání na sílu komplexace fullerenu. Komplexace byly sledovány pomocí ¹H NMR a UV-VIS spektroskopie.



Studium možností nových aplikací a detekčních metod enzymů transformujících nitrilovou skupinu

Autor: Filip Kielar
Ročník: 4.
Ústav: organické chemie
Department of Biocatalysis and Organic Chemistry, TU-Delft
Školitel: Dr. ir. L.M. van Langen

Oxynitrilasy a nitrilasy jsou enzymy katalyzující synteticky zajímavé reakce. Současný zájem o tyto enzymy pramení z možnosti jejich využití pro enantioselektivní syntézy kyanhydrinů respektive α -hydroxykyselin asymetrickou transformací achirálních prekurzorů.

Pro možnost účinně používat biokatalýzu v syntéze je nutné mít dispozici jednoduché a účinné techniky sledování aktivity enzymu. V ideálním případě je možno použít "online" experimentu v UV-VIS spektrometru. U nitrilas, které katalyzují hydrolýzu nitrilů na karboxylové kyseliny, není dosud taková metodika známa. Jedním z cílů této práce bylo pokusit se tuto metodiku vyvinout.

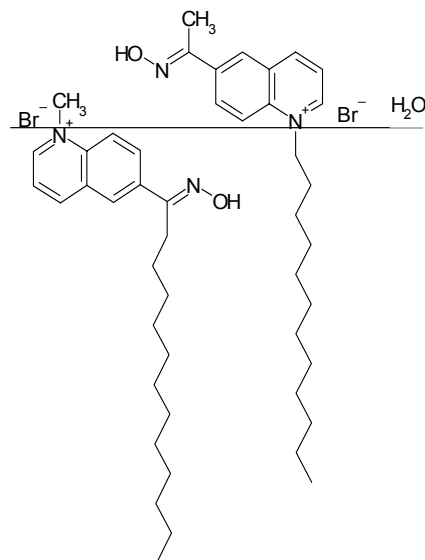
V rámci této práce byla navíc studována možnost využití oxynitrilas při Streckerově syntéze, případně při adici dalších C-nukleofilů na aldehyd.

Kvarterní chinoliniové oximy - potenciální micelární katalyzátory

Autor: Michala Kozáková
 Ročník: 5.
 Ústav organické chemie
 Školitel: Ing. Alexandra Šilhánková, CSc.
 Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

V rámci studia micelárních hydrolytických katalyzátorů byly připraveny 1-dodecyl-6-(1-hydroxyiminomethyl)chinolinium-bromid, 6-(1-hydroxyiminotridecyl)-1-methylchinolinium-bromid a 1-dodecyl-6-(1-hydroxyiminoethyl)chinolinium-bromid.

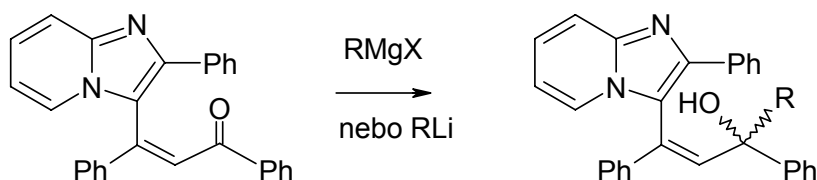
Účinnost připravených potenciálních hydrolytických katalyzátorů byla sledována spektrofotometrickým měřením kinetiky štěpení modelových substrátů difenyl-(4-nitrofenyl)-fosfátu a difenyl-(1-(1-naftylazo)-2-naftyl)-fosfátu. Hydrolytická účinnost 6-substituovaných chinoliniových oximů byla porovnána s účinností již dříve připravených isomerů substituovaných v poloze 4 a 5. Ukazuje se, že účinnost katalyzátorů závisí jak na poloze nukleofilní skupiny vůči fázovému rozhraní, tak na typu tenzidu použitého ke komicelizaci chinoliniových solí.



Diastereoselektivní adice organokovových činidel na prochirální karbonylovou skupinu

Autor: Jiří Rybáček
 Ročník: 5.
 Ústav organické chemie
 Školitel: Doc. Ing. Stanislav Böhm, CSc.

Byly studovány stereochemické aspekty adice organolithných a organohorečnatých činidel s odlišnou velikostí alkylové skupiny na prochirální karbonylovou skupinu axiálně chirálního (Z)-1,3-difenyl-3-(2-fenylimidazo-[1,2-a]pyridin-3-yl)prop-2-en-1-onu. Byla sledována diastereoselektivita reakce vycházející z racemického ketonu. Rovněž byly činěny pokusy o rezoluci obou diastereoizomerních alkoholů a jejich charakterizaci.



Příprava a reakce substituovaných pentamethiniových solí

Autor: Markéta Skalická
Ročník: 5.
Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Stanislav Böhm, CSc.

Při přípravě pentamethiniových solí jsem vycházela z pyryliových solí substituovaných v polohách 2 a 6 nebo 2,4 a 6 aromatickými substituenty (fenyl, bifenylyl, naftyl). Reakcí se třemi ekvivalenty N,N-dialkyltrimethylsilylaminů $R_2NSi(CH_3)_3$, kde $R = CH_3-$, CH_3CH_2- , $-(CH_2)_4-$, $-(CH_2)_2-O-(CH_2)_2-$, jsem připravila odpovídající pentamethiniové soli. Reakce poskytuje dobré preparativní výtěžky téměř ve všech případech. Dále jsem se zabývala reaktivitou vybraných derivátů (N,N-bis(dimethylamino)-1,3,5-trifenylnpentamethinium-perchlorátu a N,N-bis(dimethylamino)-1,5-difenylnpentamethinium-perchlorátu), za účelem syntézy látek, které by mohly mít zajímavé fyzikálně-chemické vlastnosti. Reakcí s N-bromsukcinimidem a N-chlorsukcinimidem jsem připravila pentamethiniové soli substituované halogeny, které se dají použít např. k syntéze derivátů pyridinu.

Příprava a studium reaktivity organokovových derivátů fluorhalomethanů a jejich silylovaných analogů

Autor: Jan Štambaský
Ročník: 5.
Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

K přípravě fluorovaných látek nelze využít fluorhalomethylithného ani difluorhalomethylithného stavebního bloku. Jedinou výjimkou je dibromfluormethylithium, které je omezeně stabilní při teplotě -140 °C. Pokusil jsem se připravit stabilnější fluorované organokovy jednak připojením stabilizující silylové skupiny, jednak náhradou lithia za méně elektropozitivní hořčík.

Silylovaná analoga tribromfluormethanu a trichlorfluormethanu jsem při nízké teplotě reagoval s butyllithiem. Vznikající organolithná sloučenina byla zachytávána vhodným elektrofilem. Studoval jsem vliv použitého rozpouštědla, teploty a přebytku butyllithia na výtěžek reakce.

Nízkoteplotní Grignardovou reakcí dibromdifluormethanu s Riekeho hořčíkem jsem připravil bromdifluormethylmagnesiumbromid, který byl dosud považován za zcela nestálou sloučeninu. Vzniklý organokov byl za Barbierovských podmínek reagován s různými elektrofilny.

Ab initio výpočetními metodami jsem studoval energetické hyperplochy fluorhalomethylithií a fluorhalo(trimethylsilyl)methylithií. Do výpočtů fluormethylithia jsem zahrnul i vliv modelového rozpouštědla – dimethyletheru.

Práce byla provedena za podpory grantů GA ČR 203/99/1630 a 203/02/0716.

Difosfinoazinové komplexy Ni a Pd, potencionální využití v homogenní katalýze

Autor : Jan Storch

Ročník: 4.

Ústav organické chemie

Školitel : Doc. Ing. D. Dvořák, CSc., Ing. J. Čermák, CSc.

Komplexy přechodných kovů s rigidními X-Y-Z ligandy (nazývanými "pincer ligandy") jsou v posledních několika letech v popředí zájmu koordinační a organokovové chemie. Shaw připravil potencionální terdentátní P-N-P ligand, bis(difenylofosfino)pinakolon azin, který se koordinuje ke kovu za vzniku dvou nestejně velkých kruhů. P-N-P koordinace je jednou z osmi možných koordinačních modů tohoto všestranného ligandu. Koordinační vlastnosti, na již připravené řadě bis(dialkylfosfino) nebo bis(diarylfosfino) pinakolon azinech, byly zkoumány na komplexech niklu a palladia. X-ray difrakcí byly charakterisovány čtyři krystalové struktury kationtových komplexů Ni. Byl izolován komplex, ve kterém je ligand v (E,E) konfiguraci tetrakoordinován k Pd, což je nový, osmý koordinační mód a krystalová struktura byla popsána x-ray difrakcí. Byla provedena deprotonace Ni a Pd komplexů za vzniku en-hydrazonového skeletu sloužící k modulaci elektronové hustoty na atomu kovu.

Nedávno byl publikován mechanismus Heckovy reakce, ve kterém klíčovým krokem je oxidativní adice na Pd(II) za vzniku Pd(IV). Mezi katalyzátory jsou úspěšné Milsteinovy Pd komplexy s pincer ligandy obsahující Pd-C σ vazbu. Modifikací difosfinoazinových en-hydrazonových pincer Pd komplexů byly připraveny vinyl-amidové komplexy a byly provedeny první, orientační pokusy o katalýzu v reakci styrenu s brombenzenem.

Studium možnosti asymetrického [2,3]-sigmatropního přesmyku allylových amoniových ylidů

Autor: Pavel Tužina

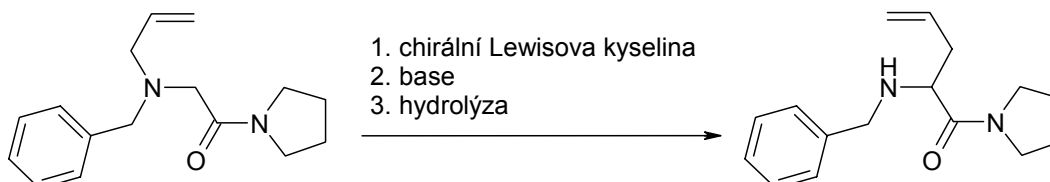
Ročník: 4.

Ústav: organické chemie VŠCHT Praha

KTH Stockholm

Školitel: Prof. Peter Somfai

[2,3]-sigmatropní přesmyk amoniových ylidů byl v minulosti velmi intenzivně zkoumán, avšak nenalezl dosud většího uplatnění v organické syntéze, a to hlavně pro svou nízkou stereoselektivitu. Další nevýhodou je fakt, že při přesmyku vzniká terciární amin, který není vhodný pro další derivatizace. Tyto nevýhody je možné do jisté míry odstranit komplexací aminu Lewisovou kyselinou, v důsledku čehož při přesmyku vzniká sekundární amin, který je vhodnou složkou pro následné přeměny. Cílem mé práce bylo prověřit možnost asymetrického [2,3]-sigmatropního přesmyku allylového terciárního aminu použitím různých typů chirálních Lewisových kyselin na bázi boru jako komplexačních činidel.



Rigidizace calix[4]arenového skeletu s využitím McMurryho reakce

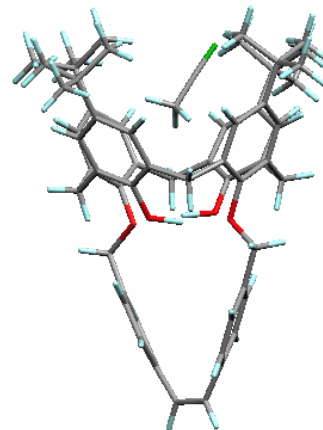
Autor : Roman Zieba

Ročník: 4.

Ústav organické chemie

Školitel : Doc. Ing. Pavel Lhoták CSc.

Aplikací McMurryho reakce na bifunkční karbonylové deriváty calix[4]arenu byly připraveny rigidní struktury vzniklé intramolekulární reakcí a obsahující stilbenovou jednotku navázanou na spodní okraj. Jejich struktura byla prokázána pomocí ^1H NMR spektroskopie a RTG strukturní analýzy. Bylo zjištěno, že tyto struktury jsou schopny komplexace neutrálních molekul s polarizovanou C-H vazbou (např. acetonitril, aceton) a bylo získáno několik krystalových struktur těchto komplexů. Schopnost komplexovat neutrální molekuly je sledovatelná i pomocí ^1H NMR spektroskopie v roztoku, čehož bylo využito pro stanovení konstant stability těchto komplexů. Dále bylo připraveno několik analogických různě rigidních struktur s cílem zjistit vliv rigidity systému na schopnost komplexace.



ORGANICKÁ CHEMIE II**Komise (ústav 110):**

Doc. Ing. František Hampl, CSc. - předseda

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

Prof. Ing. Ivan Stibor, CSc.

Doc. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Ing. Svatava Voltrová, CSc.

RNDr. Antonín Holý, DrSc. ÚOCHB AV ČR

Ing. Petr Hezký Interpharma, a.s.

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

Přihlášeno: 9 účastníků

Josef Černý

Jan Duchek

Jaroslava Havrdová

Milan Kivala

Martin Kuchař

Aleš Machara

Martin Skalický

Jiří Svoboda ml.

Tomáš Šmejkal

Příprava atropoizomerních imidazo[1,2-a]pyrimidinů

Autor: Josef Černý
 Ročník: 5.
 Ústav organické chemie
 Školitel: Doc. Ing. Stanislav Böhm, CSc.

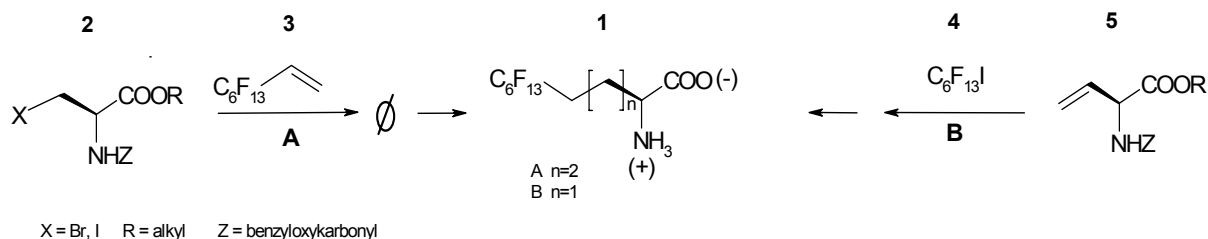
Cílem práce byla příprava a charakterizace derivátů (Z)-3-(2-fenylimidazo[1,2-a]pyrimidin-3-yl)-1,3-difenylprop-2-en-1-onu substituovaných v polohách 5,7 s bráněnou rotací okolo C-C vazby. Tyto sloučeniny byly připraveny rozšířenou Deckerovou oxidací příslušných pyridinium-perchlorátů. Následnou redukcí prochirální karbonylové skupiny pomocí NaBH₄ byly získány diastereoizomerní alkoholy, u nichž bylo určeno poměrné zastoupení jednotlivých diastereoizomerů. Výsledky byly porovnány s již známými sloučeninami s podobným skeletem.

Syntéza L-aminokyselin s perfluorovaným řetězcem

Autor: Jan Duchek
 Ročník: 5.
 Ústav organické chemie
 Školitel: Dr. Ing. Vladimír Církva

L-aminokyseliny s perfluorovaným řetězcem **1** jsou z hlediska dalšího výzkumu zajímavé ve dvou ohledech. Mohou se uplatnit při syntéze nových peptidů a také vzhledem ke svému amfifilnímu charakteru mohou sloužit jako koemulgátory v emulzích tzv. bílé krve.

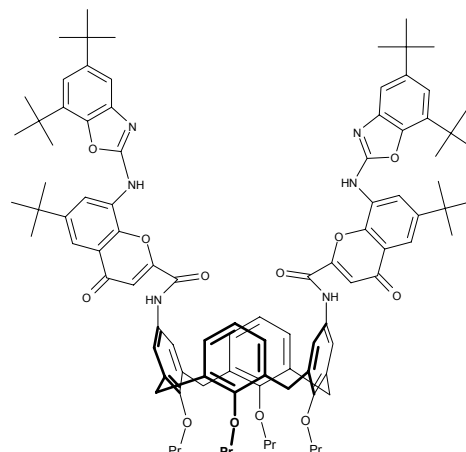
K zavedení perfluorovaného řetězce byly použity jako základní prekursor perfluoralkylethen a perfluoralkyljodid. Bylo zjištěno, že radikálová adice **A** halogenderivátu **2** na perfluoralkylethen **3** neprobíhá. Naproti tomu radikálová adice **B** perfluoralkyljodidu **4** na derivát L-vinylglycinu **5** probíhá a limituje ji příprava tohoto derivátu v dostatečném množství a čistotě.



Design a syntéza nových receptorů na bázi calix[4]arenů

Autor : Jaroslava Havrdová
Ročník: 5.
Ústav organické chemie
Školitel : Doc. Ing. Pavel Lhoták CSc.

Aminoderivát calix[4]arenu, preorganizovaný v kónické konformaci, byl využit k syntéze nového receptoru navrženého ke studiu interakcí s neutrálními molekulami. Kavita vzniklá připojením chromenonového derivátu (viz obr.) je vhodná k zachycení dikarboxylových kyselin pomocí synchronního působení vodíkových vazeb. Ke studiu komplexace byla využita ^1H NMR spektroskopie.



Studium hydrolyzy difenyl-(4-nitrofenyl)-fosfátu účinkem amfifilních ketoximů v mikroemulzi typu o/v

Autor: Milan Kivala
Ročník: 4.
Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. František Hampl, CSc.

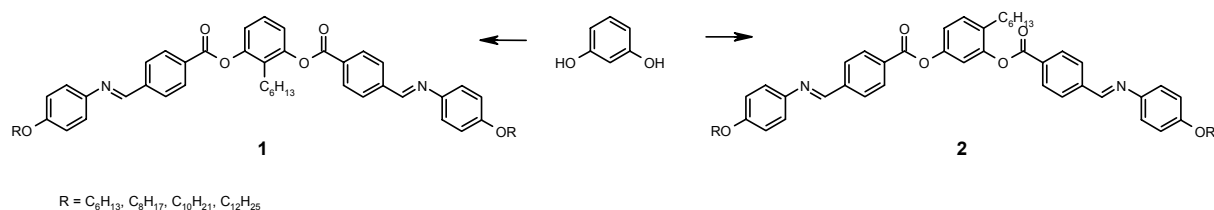
Anion vzniklý deprotonací hydroxyimino skupiny je účinným nukleofilem schopným atakovat esterovou funkci. Hydrolytická účinnost v micelárním prostředí závisí na relativní poloze nukleofilu vzhledem k fázovému rozhraní. Předpokládali jsme, že lépe definované fázové rozhraní v mikroemulzi typu o/v zvýrazní tuto závislost.

Byla syntetizována série kvarterních pyridiniových ketoximů lišících se nejen předpokládanou orientací na fázovém rozhraní olej-voda, nýbrž i lipofilitou. Jako reakční prostředí byla použita mikroemulze typu o/v stabilizovaná cetyltrimethylammonium-bromidem a 1-butanolem. Hydrolytická účinnost byla studována na modelovém substrátu difenyl-(4-nitrofenyl)-fosfátu (PNPDPP) za podmínek reakce pseudoprvního řádu. Průběh byl monitorován spektrofotometricky sledováním přírůstku koncentrace 4-nitrofenoxidového iontu při 400 nm. Zjištěné rychlosti štěpení PNPDPP v mikroemulzích typu o/v byly v souladu s výše uvedeným předpokladem.

Nové typy banánovitých kapalných krystalů odvozené od substituovaného resorcinolu

Autor: Martin Kuchař
 Ročník: 4.
 Ústav organické chemie
 Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

V rámci výzkumu nových typů kapalných krystalů jsme se zaměřili na přípravu sloučenin **1** a **2**, kde centrální jádro je derivatizováno alkylovými laterálními substituenty. Syntéza vycházela z resorcinolu a sledem reakcí jsme připravili cílové Schiffovy báze.

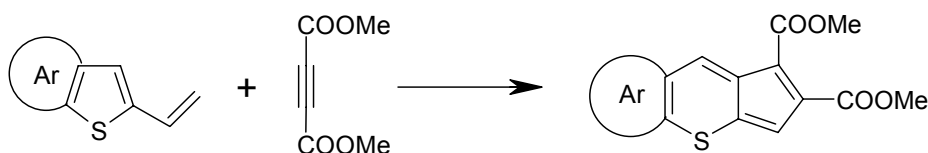


Fyzikální měření ukázala, že materiály na rozdíl od nesubstituovaného resorcinolu nevykazují mesomorfní chování.

Nestandardní průběh Dielsových-Alderových reakcí 2-vinylthiofenových derivátů s dimethyl-butyndioátem

Autor: Aleš Machara
 Ročník: 4.
 Ústav organické chemie
 Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V předchozím výzkumu reaktivity 2-vinylthieno[3,2-*b*][1]benzothiofenu v Dielsových-Alderových reakcích s řadou dienofilů jsme při reakci s dimethyl-butyndioátem (DMAD) kromě předpokládaných produktů cykloadice isolovali i thiopyranový derivát. Jeho vznik si vysvětlujeme jako důsledek nesynchronního průběhu cyklizační reakce následované dosud nepozorovaným přesmykem.



Zaměřili jsme se tedy na přípravu různých aromatických substrátů s 2-vinylthiofenovým seskupením (2-vinyl[1]benzothiofen, 2-vinylthieno[3,2-*b*]thiofen, 2-vinylthiofen) a studium jejich cykloadičních reakcí s DMAD s cílem nalézt a vysvětlit průběh těchto transformací.

Studium trisubstituovaných (difluormethyl)silanů

Autor: Martin Skalický
Ročník: 4.
Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Reakcí dvou trisubstituovaných silylchloridů, a to chlorfenyldimethylsilanu a *tert*-butylchlorodifenylsilanu s lithiem jsem připravil odpovídající silyllithia a jejich reakcí s chlordinfluormethanem dva trisubstituované (difluormethyl)silany. Na modelové reakci s benzaldehydem jsem studoval vliv zdroje fluoridového iontu a rozpouštědla na průběh adice difluormethylové skupiny. Jako nejlepší se osvědčil systém fluorid draselný - DMF ve shodě s publikovanými výsledky. (Difluormethyl)silany jsem také podrobil bromaci N-bromsukcinimidem za iniciace AIBN na odpovídající (bromdifluormethyl)silany. Pomocí *ab initio* výpočtů jsem studoval intermediáty difluormethylačních reakcí - pentakoordinované fluortrimethylsilikáty a fenyfluordimethylsilikáty s fluormethylovou, difluormethylovou a trifluormethylovou skupinou. Se zvyšujícím se počtem atomů fluoru v methylu roste délka vazeb C-Si, což je ve shodě s experimentálně pozorovanou stoupající reaktivitou s elektrofilními činidly.

Práce byla provedena za podpory grantů GA ČR 203/99/1630 a 203/00/1232.

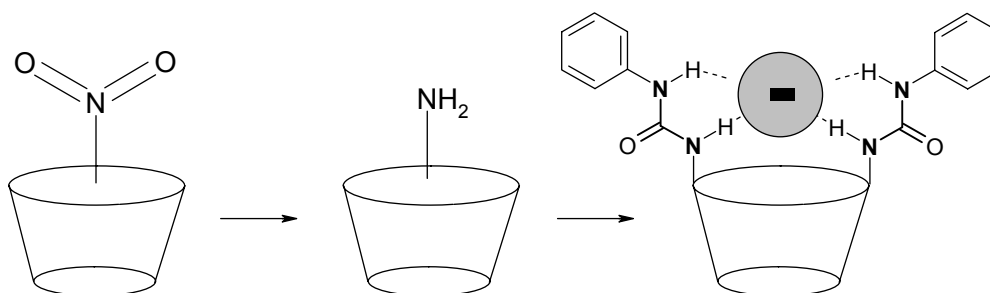
Syntézy v oblasti thiacalix[4]arenů

Autor: Jiří Svoboda ml.
Ročník: 5.
Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Tato práce je součástí systematického studia chemie thiacalixarenů. Klade si za úkol prozkoumat možnosti derivatizace horního okraje thiacalixarenové molekuly jeho nitrací a následným využitím této synteticky výhodné skupiny pro syntézu sofistikovanějších molekul a receptorů na bázi thiacalix[4]arenu.

Možnost *ipso*-nitrace tetra-*tert*-butyltetramethoxythiacalix[4]arenu byla již v naší laboratoři prostudována a popsána v literatuře¹. Prostudovali jsme také katalytickou redukci výsledného *distálního* dinitroderivátu a nyní je tato reakce zvládnuta v gramovém množství.

Následující krokem, který nyní ověřujeme, je reakce získaného diaminoderivátu s rozličnými isokyanáty, která by měla poskytnout aniontové receptory na bázi thiacalix[4]arenu.

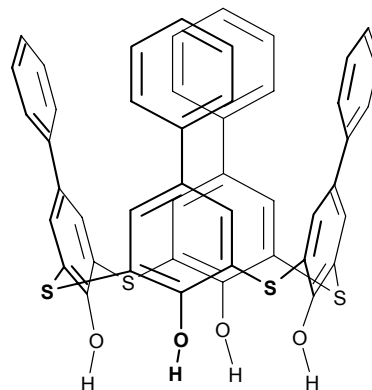


1 - Lhoták, P.; Svoboda, J.; Stibor, I.; Sykora, J.: *Tetrahedron Lett.*, **2002**, 43, 7143 - 7147

Syntéza thiacalix[4]arenů s rozšířenou kavitou

Autor: Tomáš Šmejkal
Ročník: 3.
Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Tato práce je součástí systematického studia thiacalixarenů. Zabývá se možností přípravy 5,11,17,23-tetrafenylthiacalix[4]arenu přímou kondenzační reakcí bifenylního 4-olu, síry a NaOH, optimalizací výrobního postupu a procesu izolace. Produkt reakce představuje nový thiacalixarenový derivát s hlubokou (rozšířenou) kavitou s mnoha potenciálními aplikacemi v supramolekulární chemii. Látka byla charakterizována pomocí NMR, MS a rentgenostrukturní analýzy. Dalším cílem bylo studium derivatizace spodního okraje thiacalixarenového skeletu s možností přípravy definovaných konformerů. Dále byly studovány možnosti transformace siřných můstků za vzniku příslušných oxidovaných derivátů (SO, SO₂).



ORGANICKÁ TECHNOLOGIE**Komise (ústav 111):**

Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc. - předseda

Doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.

Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Ing. Ladislav Kurc, CSc.

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

Přihlášeno: 15 účastníků

Michal Babouček

Hana Bartáková

Vojtěch Fajt

Denisa Francová

Karla Havlíčková

Petra Heroutová

Petr Chládek

Jana Kalčíková

Eliška Leitmannová

Helena Nedvědová

Lenka Přibylová

Vladimíra Skálová

Jana Skořepová

Tomáš Tlustý

Daniela Vojtová

Návrh výrobního postupu 2-sec-butylcyklohexanonu

Autor: Michal Babouček
Ročník: 5.
Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer

Předmětem této práce bylo navrhnout výrobní postup vonné látky 2-sec-butylcyklohexanonu z 2-sec-butylfenolu. Cílem bylo ověřit různé cesty přípravy produktu. První cestou byla syntéza dvoustupňová, kde v prvním stupni byl výchozí substrát selektivně hydrogenován na niklovém katalyzátoru na meziprodukt 2-sec-butylcyklohexanol, který byl v následném kroku dehydrogenován v kapalně fázi na měděných katalyzátorech na odpovídající keton. Při dehydrogenaci byl zkoumán vliv H_2 a N_2 atmosféry na rovnovážné složení a průběh reakce. Další alternativou byla přímá hydrogenace 2-sec-butylfenolu na palladiovém katalyzátoru na 2-sec-butylcyklohexanon. Na základě provedených kinetických experimentů byl navržen možný postup výroby. Podařilo se izolovat vonný produkt z dvoustupňové syntézy o čistotě 99 % při celkové výtěžnosti procesu 80,5 %. S použitím Pd katalyzátoru bylo dosaženo 98% selektivity při 90,5% koncentraci žádaného produktu. V současné době se pracuje na optimalizaci podmínek hydrogenace na Pd katalyzátoru. Součástí vyhodnocování kinetických dat bylo matematické modelování v programu ERA.

Tvorba uhlíkatých úsad při ethylenové pyrolýze

Autor: Hana Bartáková
Ročník: 5.
Ústav organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Vedlejším dějem, který je z hlediska bilancí výtěžků nepodstatný, ale významně ovlivňuje ekonomiku pyrolýzy uhlovodíků, je tvorba uhlíkatých úsad na vnitřní stěně vlásenek. Pracovní cyklus pyrolýzní pece je obvykle zastaven v okamžiku dosažení maximální povrchové teploty stěny vlásenky nebo teploty reakční směsi na výstupu z kotle na odpadní teplo. Rychlost růstu uhlíkatých úsad a vlastnosti úsad jsou závislé především na vlastnostech pyrolyzovaných surovin, reakční teplotě a parciálním tlaku uhlovodíků (stupni ředění suroviny vodní parou).

Pro zhodnocení tendence základních surovin k tvorbě uhlíkatých úsad byla využita provozní data z Chemopetrolu Litvínov za rok 2000 a 2001, doplněná získanými vzorky úsad z kotlů na odpadní teplo. Analyzovány byly povrchové teploty pyrolýzních hadů a výstupní teploty reakční směsi na konci kotlů na odpadní teplo v závislosti na typech zpracovávaných surovin. Na základě analýz se ukázalo, že povrchové teploty vlásenek a teploty reakční směsi v kotli je možné využít pro hodnocení tendence vybraných surovin k tvorbě uhlíkatých úsad. Vzorky úsad z pyrolýzy lehčích surovin lze charakterizovat vrstevnatou strukturou, u výševroucích surovin vykazují úsady porézní, globulární strukturu.

Hydrogenační aminace 1-fenyl-1-hydroxypropan-2-onu methylaminem

Autor: Vojtěch Fajt
Ročník: 5.
Ústav organické technologie
Školitel: ing. Ladislav Kurc, CSc.

Hydrogenační aminací 1-fenyl-1-hydroxypropan-2-onu methylaminem se vyrábí 1-fenyl-2-(N-methylamino)-propan-1-ol, významné psychostimulancium a β_2 -adrenergikum. Při této výrobě probíhají i nežádoucí vedlejší reakce. Práce byla zaměřena na identifikaci jednoho z významnějších vedlejších produktů, který vzniká při průmyslové výrobě 1-fenyl-2-(N-methylamino)-propan-1-olu, s molekulovou hmotností 207 g.mol^{-1} .

Vzhledem k velmi obtížně interpretovatelnému spektru této látky, které poskytuje GC-MS analýza, bylo nutné potenciální látky syntetizovat. Bylo ověřováno, zda látka s molekulovou hmotností 207 g.mol^{-1} je 1-fenyl-2-(N-butylamino)-propan-1-ol, případně ester kyseliny octové s 1-fenyl-2-(N-methylamino)-propan-1-olem. Dále byl studován mechanismus vzniku těchto látek v reakční směsi při syntéze 1-fenyl-2-(N-methylamino)-propan-1-olu.

Při přípravě 1-fenyl-2-(N-methylamino)-propan-1-olu z hydrochloridu byl zaznamenán značný bilanční úbytek této látky ve dvoufázovém systému: butylacetátový roztok 1-fenyl-2-(N-methylamino)-propan-1-olu – vodná fáze. Degradace je podmíněna přítomností kyseliny octové v butylacetátovém roztoku a její rychlost roste se vzrůstající koncentrací kyseliny a klesá s rostoucí koncentrací butanolu v butylacetátu. V souvislosti s degradací byla proměřena hydrolýza butylacetátu v promíchávaném dvoufázovém systému: provozní butylacetát – vodná fáze a stanoven rozdělovací koeficient kyseliny octové v systému butylacetát – voda.

Strukturní vlivy nenasycených alkoholů při hydrogenačních reakcích na Pd a Pt nosičových katalyzátorech

Autor: Denisa Francová
Ročník: 5.
Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer

Práce se zabývá vlivem molekulární struktury reagujícího substrátu na průběh heterogenně katalyzované hydrogenace v kapalně fázi na nosičových katalyzátorech na bázi palladia a platiny. Strukturní vlivy byly studovány ve skupině alkenických alkoholů. Pozornost byla věnována vlivu přítomnosti hydroxylové skupiny, vlivu vzájemné polohy dvojné vazby a hydroxylové skupiny a vlivu přítomnosti alkylu na uhlíkovém atomu nesoucím hydroxyskupinu. Pro studium strukturních vlivů byla použita metoda konkurenční hydrogenace, umožňující separátní diskusi vlivu struktury reagující molekuly na rychlost povrchové reakce a stabilitu adsorbovaného komplexu. Hlavním cílem práce bylo získání kvantitativních údajů o rozdílech v reaktivitě a adsorptivitě studovaných substrátů, které by umožňovaly diskusi vztahů mezi strukturou a experimentálně zjištěnými hodnotami. Experimentálně získané výsledky ve formě hodnot parametrů adsorptivity a reaktivity byly interpretovány s pomocí metod molekulárního modelování.

Modelování reakčních systémů s fázovou změnou

Jméno: Karla Havlíčková
Ročník: 5.
Ústav organické technologie
Školitel: prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc.

V práci byl studován laboratorní reaktor se zkrápěnou vrstvou katalyzátoru za podmínek částečného vypařování kapalně směsi. Modelovou reakcí byla zvolena esterifikace 2-methyl-1-propanolem katalyzovaná kyselým iontoměničem. Reakce byly prováděny při teplotě nad bodem varu vznikající azeotropické směsi (2-methyl-1-propanolacetát, 2-methyl-1-propanol, voda) a pod bodem varu těkavější reakční složky, tj. alkoholu. Přednostním vypařováním reakčních produktů, tj. esteru a vody, ve formě azeotropní směsi se zabráňuje v kontaktu produktů s katalyzátorem a tím je možno posunout chemickou rovnováhu k vyšším hodnotám konverze než je obvyklé pokud jsou všechny reakční složky přítomny v kapalně fázi. Cílem této práce bylo posunout chemickou rovnováhu jak parciálním vypařením reakční směsi, tak také periodickým dávkováním reakčních komponent do reaktoru. Přitom byl také sledován vliv přebytku alkoholu na konverzi esterifikace.

Katalytické krakování olefinů

Autor: Petra Heroutová
Ročník: 5.
Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Doc. V. Tukač, CSc.

Katalytické krakování je endotermní proces probíhající na kyselém katalyzátoru přes karboniový ion R^+ . Tvorba karboniového iontu je rychlost určujícím krokem procesu. Toto "štěpení" vazeb C-C slouží ke zpracovávání výševroucích ropných frakcí (výševroucích olejů – případně mazutu - cca od 200 °C) z atmosferické rektifikace ropy. S rostoucí poptávkou po propylen a snahou po hlubším využití surovin se pozornost zaměřuje na využití C₄ – C₆ frakcí pro výrobu propylen a ethylen.

Cílem této práce je vyhodnotit experimentální testování krakovacích katalyzátorů provedené na výzkumné jednotce v Chemopetrolu Litvínov s modelovou látkou 1-hexenem, za podmínek tlaku 150 kPa a teplot 475 – 550 °C. Pomocí programu Aspen Plus byla vytvořena počítačová simulace daného procesu a výsledky řešení modelu byly porovnány s experimentálně zjištěnými hodnotami.

S cílem zvýšit konverzi krakování suroviny a selektivitu na propylen a ethylen byl formulován matematický model založený na předpokladu rovnovážného chování reakční směsi. Experimenty byly porovnány s řešením pro ideální chování a stavovou rovnicí Peng-Robinsona.

Využití mikropulzního reaktoru pro studium kinetiky heterogenně katalyzovaných reakcí

Autor: Petr Chládek
Ročník: 5.
Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Zámostný, Ph.D.

Mikropulzní reaktory jsou užitečným nástrojem pro studium heterogenně katalyzovaných reakcí probíhajících v plynné fázi a k testování katalyzátorů. Hlavní výhody spočívají v použití velmi malých dávek katalyzátoru i reaktantu a časové nenáročnosti získávání experimentálních dat. Většina publikovaných aplikací mikropulzní techniky se omezuje na srovnávací studium selektivity a aktivity katalyzátorů a opomíjí modelování kinetiky studované reakce. Cílem práce bylo otestovat možnosti využití mikropulzního reaktoru při identifikaci kinetických modelů.

Mikropulzní reaktor použitý v této práci byl tvořen 180 mm dlouhou, uprostřed zúženou, křemennou trubicí. Vrstva katalyzátoru byla umístěna ve zúžení a překryta vrstvou inertního materiálu sloužící ke stabilizaci teploty a toku v reaktoru během nástřiku a odpařování kapalného vzorku. Reaktor byl on-line připojen na plynový chromatograf, ve kterém probíhala analýza produktů. Chování mikropulzního reaktoru bylo studováno na dehydrogenaci cyklohexanu na komerčním katalyzátoru Cherox 46-00. Pro získání spolehlivých kinetických dat bylo nutné určit režim toku, dobu zdržení a teplotní profil podél lože katalyzátoru a potlačit nežádoucí jevy spojené s nástřikem a odpařením vzorku. Získaná kinetická data byla zpracována s využitím Langmuir-Hinshelwoodova modelu.

Matematické modelování procesu mokré granulace léčiv

Autor: Jana Kalčíková
Ročník: 2.
Ústav organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc., Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Při zavádění výroby nových pevných lékových forem je nutné optimalizovat proces mokré granulace v míchaných granulátorech. K optimalizaci jsou obvykle využívány výhradně výsledky experimentů v poloprovozním granulátoru. Jako další nástroj optimalizace lze použít matematický model poloprovozního a provozního granulátoru.

Z tohoto důvodu jsou vyvíjeny semimechanistické modely provozního a poloprovozního granulátoru, obsahující popis tvorby a rozpadu granulí v ideálně míchané nádobě s výměnou tepla do okolí. Identifikace parametrů modelů vychází z poloprovozních a provozních experimentů v akciové společnosti Léčiva Praha. Sledovány byly časové změny příkonů míchadel granulátorů, teplot vsádek a složení granulované směsi analýzou digitálních obrazů. Stanoveny byly i koeficienty prostupu tepla stěnou nádob. Časové profily složení směsí byly využity při optimalizaci popisu vlastního granulačního procesu, změřené teploty a koeficienty prostupu tepla k popisu tepelných bilancí a příkonů míchadel k empirickému modelování vlivu změn složení granulované směsi na příkon míchadel. Dosavadní výsledky práce ukazují, že vyvíjené modely jsou schopné popsat vliv složení granulovaných směsí, různých otáček míchadel a poměrů objem nádoby / povrch nádoby na chování modelovaných granulátorů.

Optimalizace výrobního postupu 2-*tert*-butylcyklohexanolu

Jméno: Eliška Leitmannová
Ročník: 5.
Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer

Práce se zabývá optimalizací výrobního postupu 2-*tert*-butylcyklohexanolu hydrogenací příslušného fenolu. Tato diastereomerní látka je ceněná pro své vonné vlastnosti, přičemž ze senzorického hlediska existuje optimální poměr jejích *cis* a *trans* izomerů.

Cílem práce bylo vybrat vhodný niklový nosičový katalyzátor, z hlediska selektivity ve smyslu požadovaného poměru obou izomerů. Ve vybrané řadě komerčních niklových katalyzátorů byl studován vliv nosiče (alumina, silika) a poměr obsahu Ni versus NiO. Rovněž byl studován vliv modifikátorů – kyseliny octové a Adkinsova katalyzátoru na selektivní průběh uvedené reakce. Pozornost byla věnována rovněž kvalitě výchozí suroviny.

Na základě provedených kinetických experimentů byl nalezen vhodný niklový katalyzátor a poměr modifikujících složek pro přípravu 2-*tert*-butylcyklohexanolu s požadovaným poměrem obou vznikajících izomerů.

Kinetika katalytické mokré oxidace fenolu

Autor: Helena Nedvěďová
Ročník: 5.
Ústav organická technologie
Školitel: Doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.

Katalytická mokrá oxidace se používá k likvidaci organických nečistot v odpadních vodách z chemického průmyslu. Oxidace fenolu je modelovou reakcí vhodnou ke sledování průběhu oxidace. Cílem práce bylo sledovat rychlost oxidace fenolu a selektivitu oxidačních meziproductů vzhledem k reakčním podmínkám, teplotě a množství katalyzátoru. Reakce byla prováděna za podmínek 140 – 160°C, 5MPa, a za použití práškového katalyzátoru – aktivního uhlí Chemviron, vsádkově v autoklávu. Za předpokladu, že reakce je prvního řádu vzhledem ke kyslíku i k organickým látkám, byly určeny rychlostní konstanty pro oxidaci fenolu a pro celkovou reakci redukce CHSK. Také byla stanovena selektivita vzniklých jednotlivých meziproductů v závislosti na konverzi fenolu.

Lewisova a Broenstedova kyselost měděných nosičových katalyzátorů s nosičem na bázi SiO₂/MgO

Autor: Lenka Příbylová

Ročník: 5

Ústav organické technologie

Školitel: Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Teplotně programovaná desorpce (TPD) bazických sorbátů, 2,6- a 3,5-dimethylpyridinů, je v literatuře popsána jako metoda vhodná k rozlišení kyselých center Lewisova a Broenstedova typu na povrchu silikáto-hořečnatých materiálů. V molekule 2,6-dimethylpyridinu je volný elektronový pár na dusíku stíněn dvěma methylovými skupinami, které stéricky brání sorpci molekuly na centra Lewisova typu. Naproti tomu v molekule 3,5-DMP je elektrondonorové místo stéricky přístupné a proto se tento izomer může sorbovat na oba typy kyselých center. Díky malým rozdílům v bazicitě sorbátů 2,6- a 3,5-dimethylpyridinů je zajištěna sorpce na spektru center o shodné síle kyselosti. Předmětem této práce je pokus o aplikaci výše zmíněné metody na stanovení obou typů kyselých center ve vzorcích bifunkčního měděného katalyzátoru s nosičem na bázi SiO₂/MgO. Naměřená DMP-TPD spektra byla užita k posouzení, zda uvedená metoda je dostatečně citlivá ke vlivu složení nosiče, zvláště molárního poměru SiO₂/MgO a obsahu železité složky, na jeho acidobazické vlastnosti.

Detekce ukončení procesu mokré granulace léčiv

Autor: Vladimíra Skálová

Ročník: 5.

Ústav organické technologie

Školitel: Ing. Olga Přechová

Proces mokré granulace léčiv je důležitým krokem při výrobě pevných lékových forem. Granulát, který je získáván tímto postupem, je dále zpracováván, a proto je nutné dosáhnout standardních výstupních parametrů vznikajícího granulátu. Cílem práce bylo proto zhodnotit spolehlivost dosavadního způsobu zakončování provozních granulací, který je založen na sledování příkonu hlavního míchadla, a ověřit další možnosti detekce ukončení.

Experimentální měření probíhala se čtyřmi typy léčiv v provozních míchaných granulátorech typu GRAL a FIELDER v Léčivech a.s. Během granulačního procesu byly sledovány časové závislosti příkonu hlavního míchadla a nově také teploty vsádky. Po ukončení granulace byly z odebíraných vzorků granulovaných směsí pořízeny digitální fotografie. S využitím programů Adobe Photoshop 7.0 a Matlab 6.1 Image Processing Toolbox byl objektivizován vzhled granulátu a z něho vyhodnocen stupeň zgranulování směsi. Bylo zjištěno, že příkon míchadla nelze považovat za spolehlivé kritérium ukončení granulace. Dalším parametrem, který by bylo možné využít k detekci ukončení granulace, je teplota vsádky, resp. množství tepla dodaného do procesu mokré granulace přeměnou mechanické energie míchadla na ohřev vsádky.

Dynamický model zkrápěného reaktoru řízeného změnou rychlosti nástřiku

Autor: Jana Skořepová

Ročník: 5.

Ústav organické technologie

Školitel: Prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc.

Třífázový zkrápěný reaktor bývá zpravidla řízen v režimu filmového toku, kdy kapalina stéká po vrstvě katalyzátoru v podobě laminárního filmu. Kontakt fází je při tomto režimu nedostatečný a rychlost chemické reakce je proto řízena odporem přenosu tepla a hmoty. Dávujeme-li kapalnou reakční směs do reaktoru periodicky, přechází reaktor za určitých podmínek do režimu pulsního toku. Výhodou tohoto režimu je intenzivnější přenos tepla a hmoty mezi fázemi, čímž se dosáhne vyššího výkonu reaktoru. Zároveň se díky lepšímu smáčení katalytické vrstvy eliminují horké zóny na povrchu katalyzátoru. Průměrný průtok kapalně fáze se udržuje na hodnotě, která odpovídá rychlosti nátoky kapaliny do reaktoru v režimu filmového toku. Tím nedochází k nežádoucímu zkrácení doby zdržení. Úkolem studie je sestavení matematického modelu popisujícího chování adiabatického zkrápěného reaktoru řízeného periodickým zvyšováním průtoku kapalně fáze. Model je založen na představě náhrady zkrápěného reaktoru kaskádou adiabatických průtočných promíchávaných reaktorů. Řešení modelu vede k popisu časově proměnných teplotních, koncentračních a objemových vln v loži katalyzátoru.

Optimalizace průmyslové rektifikační kolony na základě naměřených rovnovážných dat kapalina-pára

Autor: Tomáš Tlustý

Ročník: 5.

Ústav organické technologie

Školitel: Ing. Miroslav Petrisko, CSc.

Data rovnováh g-l potřebná k simulaci rektifikačních kolon nejsou často v literatuře, vzhledem k počtu chemických látek a jejich kombinacím ve formě směsí, k dispozici. Někdy jsou tato data dokonce nesprávná. Jedním z úkolů této práce bylo experimentální měření rovnováhy g-l systému N,N-dimethylaminoethanol (DMAE)—voda. Příkladem nesprávnosti literárně uváděných dat je azeotrop daného systému při tlaku 25 kPa. V literatuře je uveden pro tento tlak azeotrop o obsahu 1,8 hm.% DMAE. Námi uskutečněná měření jeho výskyt při daném tlaku vylučují.

Rovnovážná data g-l byla měřena metodou diferenciální destilace. Na základě získaných dat byly pomocí programu Aspen plus vyhodnoceny parametry Wilsonovy rovnice. Popis rovnováhy g-l byl pak použit pro simulaci existující průmyslové rektifikační kolony s cílem zjistit optimální polohu nástřikového patra zajišťující nejmenší obsah DMAE v destilátu. Tato poloha se výrazně liší od polohy užívané v praxi. Změnou nástřikového patra na námi zjištěnou polohu by se dle simulace dosáhlo řádově menších hodnot obsahu DMAE v destilátu, který způsobuje ekologické obtíže. Dále byl simulován vliv počtu teoretických pater na složení destilátu. Zvýšení počtu teoretických pater kolony lze provést záměnou části kloboučkových pater za orientovanou výplň.

Transformace laboratorního hodnocení surovin ethylenové pyrolýzy do provozních podmínek

Autor: Daniela Vojtová

Ročník: 4.

Ústav organické technologie

Školitel: Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc., Ing. Petr Zámostný, Ph.D.

Důležitým úkolem při řízení provozní ethylenové pyrolýzy je hodnocení kvality benzinů, atmosférických plynových olejů a destilačních zbytků z hydrokrakování nabízených externími dodavateli. Je proto zkoumána možnost hodnocení surovin pyrolýzou v laboratorním reaktoru s následnou transformací získaných informací do provozních podmínek.

Jednu z možností transformace dat představují umělé neuronové sítě. Pro přenos výsledků laboratorních testů byla použita umělá neuronová síť s kombinovanými vstupy údajů z laboratorních a provozních podmínek a s výstupy predikující provozní výtěžky methanu, ethylenu a propylenu. Jako vstupy neuronové sítě z provozních podmínek byly použity zatížení provozního reaktoru, ředící poměr pára/surovina a výstupní teplota reakční směsi na konci vlásenky typu SRT III. Laboratorní experimenty, doplněné o hustotu pyrolyzované suroviny, jsou zastoupeny výtěžky methanu, ethylenu a propylenu, získané pyrolýzou uhlovodíkových směsí v laboratorním pulzním reaktoru. Jako optimální se ukázala dopředná neuronová síť s jednou skrytou vrstvou neuronů. Dosavadní zkušenosti s přenosem výsledků laboratorních experimentů do provozních podmínek ukazují, že lze s dostatečnou spolehlivostí predikovat chování jakéhokoliv typu suroviny v provozním reaktoru.

ANORGANICKÁ CHEMIE

Komise (ústav 101):

Doc. RNDr. Josef Stejskal, CSc.- předseda

Ing. Irena Hoskovcová, CSc. – organizační tajemník

Ing. Libor Mastný, CSc.

Ing. Pavlína Třešňáková

Ing. Přemysl Beran

Přihlášeno: 8 účastníků

Ondřej Beneš

Ondřej Bučina

Václava Jahnová

Vít Jakeš

Olga Kubová

Linda Salavcová

Veronika Semencová

Zdeněk Sofer

Struktura a vlastnosti tuhých roztoků $\text{Bi}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x=0,3-1,0$)

Autor: Ondřej Beneš
Ročník: 3.
Ústav anorganické chemie
Školitel: David Sedmidubský

Pevné roztoky $\text{Bi}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ jsou členem rozsáhlé skupiny perovskitů $\text{A}_{1-x}\text{A}'_x\text{MnO}_3$ se směsnou valencí manganu $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$. Proměnné valence je dosaženo heterovalentní substitucí kationtu A^{3+} (La^{3+} , Pr^{3+} , Sm^{3+} , Bi^{3+}) kationtem A^{2+} (Ba^{2+} , Sr^{2+} , Ca^{2+}). Se změnou teploty nebo složení x dochází v těchto systémech k přechodům kov-izolátor. Je-li tato transformace vyvolána magnetickým polem, dochází k jevu označovanému jako kolosální magnetorezistence. Studovaný systém je navíc charakteristický přechodem do stavu uspořádání náboje (CO) při relativně vysokých teplotách ($T_{\text{CO}} \sim 540$ K, $x=0,5$), který je při dalším ochlazení doprovázen antiferomagnetickým uspořádáním, což je zajímavé z fundamentálního hlediska. Jako slibné se též jeví potenciální využití těchto sloučenin ($x \rightarrow 1$) jako materiálů pro termoelektrické aplikace (vysoký záporný Seebeckův koeficient α a nízký měrný odpor ρ a tepelná vodivost λ) za zvýšených teplot. Z uvedených důvodů jsou v této práci podrobně studovány elektrické a tepelné transportní vlastnosti jako funkce teploty a složení x . Ve vysokoteplotní limitě byl zjištěn postupný nárůst α se vzrůstajícím x (~ -150 $\mu\text{V/K}$ pro $x=0,9$), zatímco ρ vykazuje maximum pro $x=0,7$. Od teploty T_{CO} , která klesá s rostoucím x ($T_{\text{CO}}=0$ pro $x=0,8$), je u všech vzorků pozorován postupný pokles α až k minimu při teplotě antiferomagnetického přechodu ($T_N \sim 140$ K). Naměřené fyzikální vlastnosti jsou korelovány se strukturními parametry upřesněnými z rtg. difrakční analýzy.

Růst a charakterizace monokrystalů manganitů v systému (Bi, Sr, Ca) MnO_3

Autor: Ondřej Bučina
Ročník: 3.
Ústav anorganická chemie
Školitel: Doc. Ing. Miloš Nevřiva, DrSc.

Manganity obecně odvozují svoji strukturu od kubické perovskitové struktury ABO_3 ($\text{A} = \text{Bi, Sr, Ca}$; $\text{B} = \text{Mn}$). Poměr trojmocného prvku (Bi) a dvojmocného prvku (Sr, Ca) určuje poměr iontů $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$, který má vliv na charakteristické vlastnosti těchto látek. Fyzikální vlastnosti manganitů jsou odlišné od vlastností manganitů vzácných zemin $\text{Ln}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ ($\text{Ln} = \text{La, Pr, Nd}$; $\text{A} = \text{Ca, Sr}$). Například kritická teplota přechodu k nábojovému uspořádání (CO – charge order, tj. pásové uspořádání Mn^{3+} a Mn^{4+} iontů), je u $\text{Bi}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{MnO}_3$ $T_{\text{CO}} = 525$ K a u $\text{Bi}_{0,5}\text{Ca}_{0,5}\text{MnO}_3$ je $T_{\text{CO}} = 342$ K. Tyto teploty jsou znatelně vyšší než např. u $\text{La}_{0,5}\text{Ca}_{0,5}\text{MnO}_3$, kde $T_{\text{CO}} \cong 250$ K a u stronciem dopovaných manganitů vzácných zemin dokonce k CO nedochází.

Monokrystal manganitů se s ohledem na inkongruentní charakter jejich tání obecně připravují metodou růstu krystalů z vysokoteplotních tavenin. Východí látky CaMnO_3 , SrMnO_3 , MnO_2 a Bi_2O_3 byly smíšeny ve stechiometrických poměrech a byly stanoveny teploty liquidu (T_L) a eutektika (T_E) připravených směsí. Jako tavivo se použil přebytek Bi_2O_3 . Růst krystalů byl zahájen z $T_L + 50$ K a ukončen při $T_E + 50$ K. Rychlost ochlazování taveniny byla 1 K za hodinu. Po úplném vychladnutí byly krystaly odděleny od taveniny loužením ve zředěné HNO_3 (1:1). Fázové a chemické složení připravených krystalů bylo stanoveno rtg-difrakční analýzou, resp. atomovou absorpční spektroskopií.

Redox chování komplexů Fe (III) modelujících tyrosinové proteiny

Autor: Václava Jahnová

Ročník: 5.

Ústav anorganické chemie

Školitel: ing. Irena Hoskovcová, CSc

Tyrosinové proteiny jsou jedním typem nehemových proteinů obsahujících železo, které jsou nezbytné pro metabolismus obratlovců. Pomocí jednodušších modelů nahrazujeme složitou strukturu metalloproteinu a získáváme tak důležité informace o jeho chování a vlastnostech.

Práce, na něž navazujeme, se zabývaly zkoumáním vlivu postranního řetězce aminokyseliny na vlastnosti komplexů modelujících molekulu tyrosinu.

Byly připraveny komplexy s ligandy typu Schiffových bází ($K[Fe(sal-aa)_2]$, kde sal =salicyliden) a redukovaných Schiffových bází ($K[Fe(hb-aa)_2]$, kde hb =N-(2-hydroxybenzyl)), aa představuje aminokyselinu – glycín (gly), alanin (ala), valin (val), leucin (leu), isoleucin (ile) a isomáselnou kyselinu (ibu).

Dříve změřená UV/VIS spektra odrážejí vliv postranního řetězce aminokyseliny na prostorové uspořádání v okolí kovu. Měření klasickou polarografickou metodou ukazují, že redukce probíhá ve dvou stupních a jejich půlvinové potenciály rovněž závisejí na povaze bočního řetězce aminokyseliny. Celý proces je komplikován adsorpčními a kinetickými jevy.

Naším cílem je objasnit souvislost mezi strukturou komplexu a jeho redox chováním odrážejícím reaktivitu látky vůči okolí.

Modifikace vlastností vysokoteplotního supravodiče BiSrCaCuO 2223

Autor: Vít Jakeš

Ročník: 5.

Ústav anorganické chemie

Školitel: Doc. Ing. Dagmar Sýkorová, CSc.

Vlastnosti vysokoteplotní supravodivé fáze $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_x$ (fáze 2223, kritická teplota $T_c = 110$ K) lze modifikovat jednak substitucí heterovalentních prvků za již přítomné, jednak dopováním atomy dalších prvků. Takto lze např. částečnou substitucí bismutu olovem podstatně usnadnit vznik fáze 2223, za cenu mírného snížení T_c na 107 K.

Cílem práce bylo zjistit, jaký vliv na elektrické a magnetické vlastnosti supravodiče má změna technologických parametrů přípravy vzorků reakcí v pevné fázi. Byla měněna doba slinování a olovo ve formě PbO bylo přidáváno v jednotlivých fázích přípravy. Dále byl zkoumán vliv přídavku nadstechiometrických množství cesia (Cs_2CO_3) na elektrické vlastnosti vzorků složení $Bi_{3,2}Pb_{0,8}Sr_4Ca_5Cu_7Cs_yO_x$, kde $y = 0; 0,8; 1,6; 3,2$.

Připravené vzorky byly charakterizovány měřením teplotních závislostí odporu, kritické proudové hustoty a magnetické susceptibility.

Metoda hodnocení fotoaktivity titanové běloby

Autor: Olga Kubová

Ročník: 5.

Ústav anorganické chemie

Školitel: Ing. Zlatko Šrank, CSc. , Ing. Libor Mastný, CSc.

Titanová běloba patří do skupiny významných bílých anorganických pigmentů, který se využívá k vybarvování celé řady výrobků, zejména pak nátěrových hmot a plastů. Pro její nosnou složku - oxid titaničitý - je typická určitá míra fotoaktivity. Fotoaktivita je ve výše uvedených aplikacích obvykle nežádoucí, protože způsobuje degradaci pojivového systému. Proto je míra fotoaktivity jedním z důležitých parametrů tohoto pigmentu.

Cílem této studie je vypracování nové metodiky hodnocení fotoaktivity titanové běloby umožňující získání výsledků v relativně krátkém časovém intervalu.

Na základě provedených experimentů byla navržena metoda, která je založena na měření změny optických parametrů tenkého filmu suspenze titanové běloby a organického barevného indikátoru v glycerinu během jeho expozice světelným zdrojem. Pro hodnocení titanových bělob, které se výrazně liší ve fotoaktivitě, byl z použitého souboru barevných indikátorů navržen eosin. Pro hodnocení titanových bělob vykazujících malou a nepříliš odlišnou fotoaktivitu byla jako barevný indikátor navržena bromthymolová modř. Metodika umožňuje rychlé porovnání vzorků titanových bělob bez ohledu na rozdíl v jejich fotoaktivitách.

Studium přípravy a vlastností „lithných“ planárních optických vlnovodů ve sklech

Autor: Linda Salavcová

Ročník: 5.

Ústav anorganické chemie

Školitel: RNDr. Jarmila Špírková, CSc.

Jednovidové (málovidové) planární optické vlnovody připravené iontovou výměnou v dielektrických podložkách jsou dnes již běžně používanými součástkami integrovaných optických obvodů pro široký rozsah použití. Hlavní výhodou využití iontové výměny s účastí Li^+ , tj. přípravy tzv. „lithných“ vlnovodů, by měly být jejich velmi nízké optické ztráty. Nevýhodou této iontové výměny je velká rychlost migrace Li^+ skleněným substrátem, která má za následek vznik mnohavidových vlnovodů a silné poškození povrchu skleněných substrátů.

V tomto příspěvku jsou uvedeny výsledky studia přípravy málovidových „lithných“ vlnovodů iontovou výměnou $\text{Li}^+ \leftrightarrow \text{Na}^+$ v sodno-vápenatých křemičitanových sklech. Provedené experimenty směřovaly k podstatnému zpomalení difúzního procesu tak, aby výsledkem byl málovidový vlnovod s nepoškozeným povrchem. Vedle navržení optimálního experimentálního postupu byla provedena i podrobná charakterizace připravených optických vrstev. Hlavní metodou pro studium složení vlnovodných vrstev byla NDP (Neutron Depth Profiling), kterou bylo možné sledovat provedené změny distribuce lithia. Optické vlastnosti připravených vlnovodů byly charakterizovány měřením vidových spekter, hloubkových profilů indexů lomu a optických ztrát. Z obecného hlediska byla pozornost věnována pohybu lithia ve sklech, toto studium vedlo k výpočtu difúzních koeficientů.

Vylučování tenkých vrstev na substráty pro replikaci rentgenové optiky

Autor : Veronika Semencová
Ročník : 5.
Ústav anorganické chemie
Školitel : Doc.Ing. Vratislav Flemr, CSc.

Zrcadlová optika na bázi niklu se využívá pro fokusaci RTG-záření. Na tuto optiku jsou kladeny mimořádné nároky z hlediska kvality optického povrchu, zejména jeho mikrodrsnosti. Substrát musí být vyroben z takového materiálu, aby bylo snadné provést sejmutí repliky niklového povlaku na základě rozdílné teplotní roztažnosti mezi substrátem a replikou. Jako vhodný substrát pro niklové povlaky se ukázala hliníková slitina AlMg5.

Cílem této práce je na vysoce lesklý povrch substrátu chemicky vyloučit bezporézní, tvrdou a vysoce adhezí vrstvu, která dokonale kopíruje optický tvar substrátu. Při přímém nanesení elektrochemického povlaku niklu na hliníkový substrát je replika napadena bodovou korozí a její povrch není lesklý. Korozi elektrochemické repliky lze zabránit chemickým vyloučením podkladové niklové vrstvy z lázně na bázi mléčnanu nikelnatého. Dobrou adhezí chemicky vyloučeného povlaku lze docílit správnou předúpravou povrchu, popř. mezivrstvou. Kromě různých režimů vylučování niklového povlaku a různých složení lázní byly sledovány mechanické i optické vlastnosti povlaku. Kvalita vyloučeného povlaku byla studována na elektronovém mikroskopu.

Příprava tenkých vrstev GaN metodou MOVPE

Autor: Zdeněk Sofer
Ročník: 4.
Ústav anorganické chemie
Školitel: Doc. RNDr. Josef Stejskal, CSc.

Nitridy prvků 13. skupiny jsou perspektivní polovodičové materiály. Nacházejí uplatnění především jako planární vlnovody, vysokofrekvenční polovodičové prvky, LED diody a lasery na vlnových délkách 350 – 550 nm. Nitridy prvků 13. skupiny mají velmi variabilní šířku zakázaného pásu (InN 1,5eV, GaN 3,4eV a AlN 6,4eV). Tuto šířku můžeme plynule měnit změnou složení ternárního systému. Výhodou oproti ostatním AlIBV polovodičům, např. GaAs, je i značná tepelná a chemická stabilita. Práce je zaměřena na přípravu monokrystalických vrstev nitridu gallitého na safírových substrátech s orientací (0001) z organokovových systémů.

V rámci grantového projektu č. 104/00/0572 GA ČR byla v Ústavu anorganické chemie VŠCHT zkonstruována aparatura pro přípravu tenkých vrstev těchto materiálů technologií MOVPE. Jako vstupní látky (prekursory) jsme použily trimethylgallium (TMG) a amoniak. Safírový substrát s orientací (0001) na molybdenovém nosiči je indukčně vyhříván na teplotu 500 až 1100 °C. Depozice nitridu gallitého může probíhat při normálním i sníženém tlaku. Jako nosný plyn pro transport TMG do prostoru depozice slouží vysoce čistý vodík, připravený v Pd-difúzní čističce. Připravené vrstvy jsou charakterizovány metodou optické a elektronové mikroskopie, elektronovou mikroanalýzou, rtg difrakcí a fotoluminiscencí.

ANORGANICKÁ TECHNOLOGIE**Komise (ústav 105):**

Doc. Ing. Daria Schrötterová, CSc. – předseda

Ing. Ilona Jandová

Ing. Ivona Sedlářová

Dr. Ing. Josef Krýsa

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

Přihlášeno: 7 účastníků

Lenka Bejrová

Tomáš Bystroň

Jakub Jirkovský (2x)

Roman Kodým

Jiří Macek

Zuzana Mácová

Lenka Svobodová

Kapalinová extrakce Rhenia

Autor: Lenka Bejrová
Ročník: 5.
Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc.Ing. Daria Schrötterová, CSc.

Úvod práce je zaměřen na přehled vlastností, použití a metod zpracování surovin s obsahem Re(VII) a možnosti jeho oddělování od prvků, se kterými se nejčastěji vyskytuje. Důraz je kladen na možnosti separace solí Re(VII) kapalinovou extrakcí. V práci jsou prezentovány výsledky studia extrakce solí Re(VII) z vodných roztoků primárním aminem Primenem JM-T. Práce navazuje na studium aminové extrakce solí jiných prvků, hlavně Mo(VI), protože tato metoda představuje výhodnou možnost dělení těchto prvků.

Extrakce byla prováděna roztokem síranu Primenu JM-T v rozpouštědle Spiridane D 40 s přidavkem 5% oktylalkoholu. Měření rovnováhy bylo provedeno na vzorcích při poměru objemů fází vodná : organická 1:1 až 1:6. Rovnováha byla dosažena potřepáváním při laboratorní teplotě. Vodné roztoky byly připraveny rozpouštěním oxidu rhenistého ve vodě, resp. kyselině sírové v rozmezí koncentrací od 0,3 do 7M H_2SO_4 . Byly proměřeny základní parametry při rovnovážné extrakci (dobu dosažení rovnováhy, pH, koncentrace Re a SO_4^{2-}), extrakční isoterma při pH 1,64 a závislost extrakce Re(VII) na koncentraci H_2SO_4 .

Vodivé polymery jako nosiče katalyzátoru v palivových článcích

Autor: Tomáš Bystroň
Ročník: 3.
Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc. Dr. Ing. Karel Bouzek

Nízkoteplotní palivové články s PEM (proton exchange membrane) představují velmi nadějný alternativní zdroj energie s možností širokého uplatnění. Dosud však přetrvává řada problémů, které je nutno překonat k jejich plnému využití. Mezi nejpalčivější z nich patří využitelnost a stabilita anodového katalyzátoru (Pt, Pt/Ru). Možným řešením je jeho zabudování do filmu vodivého polymeru (CP). Jako nejvhodnější nosiče se v současnosti jeví polypyrol (PPy) a polyanilin (PAni).

Cílem této práce je nalézt vztahy mezi způsobem přípravy CP/Pt filmu, jeho strukturou a vlastnostmi. Elektrochemicky lze CP/Pt film připravit třemi způsoby 1. vyloučením Pt na CP film; 2. syntéza CP z roztoku s koloidní Pt; 3. zabudováním Pt do CP při jeho syntéze ve formě protiiontu s následnou redukcí. Obecně je elektrokatalytická aktivita filmů vyšší než u samotné Pt, přičemž nejvyšší je u filmu připraveného třetím způsobem. Velmi významným parametrem se ukázala být potenciálová mez redukce $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ iontu. Příliš katodická hodnota tohoto potenciálu vede na kompozity se sníženou aktivitou. Příčinou jsou zřejmě změny ve struktuře filmu. Jak bylo dále zjištěno, použití polyaniontu (Nafion®, polystyrensulfonát) jako nukleofilu v průběhu syntézy vede ke vzniku filmů s odlišnou morfologií ve srovnání s filmy připravenými z roztoku chloridů a zároveň zvyšuje permeabilitu PPy pro vodík.

Vliv kyseliny trihydrogenfosforečné na průběh reakce apatitu Kola super s kyselinou dusičnou

Autor: Jakub Jirkovský
Ročník: 5.
Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc. Ing. Jan Vídenský, CSc.

Pro optimalizaci rozkladných zařízení při výrobě kombinovaných hnojiv typu NPK, nebo pro návrh nových je potřebná znalost kinetiky rozpouštění fosfátů kyselinou dusičnou. Jedná se o heterogenní nekatalyzovanou reakci mezi kapalnou a pevnou fází. Průběh a vlivy uplatňující se při této reakci nejsou zcela objasněny. Bylo zjištěno, že nezanedbatelný význam mají produkty reakce. Tato práce se zabývá studiem vlivu jednoho z reakčních produktů, kyseliny trihydrogenfosforečné, na průběh reakce. Všechny experimenty byly provedeny ve vsádkovém izotermním reaktoru s úzkou frakcí částic apatitu Kola super. Rozklad byl prováděn kyselinou dusičnou s přídavkem kyseliny trihydrogenfosforečné. Reakční směs byla použita v takovém přebytku, že se její koncentrace během reakce prakticky neměnila. Průběh rozkladu byl sledován vážením nezreagovaného zbytku apatitu po přerušení reakce. Výsledkem provedených měření jsou závislosti stupně konverze na čase. Experimentální údaje byly zpracovány pomocí vztahů odvozených z modelu nezreagovaného jádra s použitím kinetické rovnice exponenciálního typu. Zjištěn byl výrazný brzdící vliv kyseliny trihydrogenfosforečné na průběh reakce, který roste s její stoupající koncentrací v reakční směsi.

Příprava platinových elektrod s vysokým měrným povrchem pro použití při stimulaci nervových tkání

Autor: Jakub Jirkovský
Ročník: 5.
Ústav anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Josef Krýsa, Dr. Sydney White

Elektrostimulace nervových tkání ušního nervu má významný vliv na obnovu funkce poškozených nervových tkání. Pro tuto stimulaci je nutné pracovat za podmínek, kdy nedochází k elektrochemickým procesům, jako je uvolňování plynu, t. j. v oblasti potenciálu, kdy na povrchu elektrody probíhají pouze nefaradayické děje (nabíjení dvojvrstvy, adsorpce, desorpce). Aby mohl při elektrosimulaci probíhat dostatečně vysoký proud je nutné používat elektrody s vysokým skutečným povrchem. Platinové elektrody s vysokým povrchem byly připravovány podle Ottenova patentu (1994) použitím čtvercových napěťových pulsů o různé frekvenci. Princip metody spočívá ve vzniku a následné redukci oxidické vrstvy na platinové elektrodě. Prošlý náboj odpovídající povrchu připravených elektrod byl odhadnut metodou cyklické voltametrie. Povrch byl sledován pomocí řádkovacího elektronového mikroskopu. Byla pozorována významná změna povrchu elektrod. Nárůst povrchu závisí především na použité frekvenci pulsu a době jeho aplikace. Použitá metoda se jeví jako perspektivní pro přípravu účinnějších platinových elektrod určených k elektrostimulaci nervové tkáně.

Model kinetiky spřažené difúze.

Autor: Roman Kodým
Ročník: 4.
Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc.Dr.Ing. Karel Bouzek

Iontově selektivní membrány dnes patří mezi hojně využívané, moderní a stále se rozvíjející materiály. Nacházejí široké uplatnění v technické praxi, např: v průmyslových procesech, senzorech a v poslední době rovněž i v palivových článcích typu PEM (Proton Exchange Membrane), ve kterých nahrazují kapalný elektrolyt. Tyto články se jeví jako velmi perspektivní náhrada současných zdrojů elektrické energie. Jejich plnému využití brání některé negativní vlastnosti dnes nejčastěji používané perfluorované membrány typu Nafion (vysoká cena, snadné vysychání membrány při teplotách vyšších než 100 °C a s tím spojená malá iontová vodivost). Jednou z možných alternativ se jeví membrána na bázi sulfonovaného polyfenylenoxidu (SPPO).

V této práci je předkládán model kinetiky spřažené difúze dvou protiiontů v iontově selektivní membráně, který předpokládá lineární závislost difúzních koeficientů D_A a D_B na obsahu vody v membráně. Odvozená parciální diferenciální rovnice byla řešena metodou konečných diferencí za použití Crank-Nicolsonova schématu. Hodnoty D_A a D_B byly optimalizovány tak, aby přechodová funkce vypočtená pomocí modelu odpovídala experimentálně stanoveným hodnotám. Funkčnost modelu byla ověřena při vyhodnocení kinetiky iontové výměny nově syntetizovaných membrán typu SPPO.

Testování katalyzátorů pro aromatizaci methanu

Autor: Jiří Macek
Ročník: 3.
Ústav anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Neoxidativní vysokoteplotní katalytická transformace a dehydrogenace methanu je jednou z možností zpracování zemního plynu na produkty vyšší užitné hodnoty, zejména benzen a další aromáty.

Nejvhodnějšími katalyzátory pro aromatizaci methanu se zatím jeví zeolity modifikované ionty přechodných kovů. Byly testovány katalyzátory na bázi zeolitů H-ZSM-5 a H-MCM-22 s přídavkem Mo. V průběhu katalytických testů byl sledován vliv obsahu Mo a reakční teploty na selektivitu k benzenu a konverzi methanu. V rámci této práce byla též studována možnost regenerace daných katalyzátorů.

Na základě provedených testů se ukázaly jako nejvhodnější katalyzátory na bázi H-ZSM-5 (mol. poměr Si:Al = 15) s obsahem Mo mezi 2-4 hmot.% a na bázi H-MCM-22 přibližně s 3 hmot.% Mo. Při studiu možností regenerace katalyzátorů se ukázalo, že je možná pouze částečná regenerace. Bylo zjištěno, že v průběhu reakce vznikají uhlíkaté úsady, která lze odstranit až při teplotách okolo 1000°C což je za hranici teplotní stability připravovaných katalyzátorů.

Elektrochemická redukce NO_3^- na bimetalických materiálech

Autor: Zuzana Mácová
Ročník: 5.
Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc. Dr. Ing. Karel Bouzek

Dusičnanové ionty významně znečišťují životní prostředí a to především vodní zdroje. V současnosti jsou hledány a zdokonalovány cesty k jejich účinnému odstranění a převedení na jiné, ekologicky nezávadné, látky. Předkládaná práce se zabývá elektrochemickou redukcí dusičnanů ve slabě alkalickém prostředí. Z předchozí studie vyplynulo, že nejvyšší účinnosti ve studovaném prostředí (nasycený roztok NaHCO_3) dosahuje měď, avšak produktem redukce NO_3^- je nežádoucí čpavek. Z literatury vyplývá, že elektrokatalytickou selektivitu materiálu lze ovlivnit přidávkou dalšího kovu - příčinou je tzv. bifunkční katalýza.

Měřený roztok odpovídal složením regeneračnímu roztoku odcházejícímu z iontoměničové kolony pro odstranění dusičnanů z kontaminované vody. S využitím metody cyklické voltametrie (CV) na rotační diskové elektrodě s prstencem (RRDE) byla sledována kinetika a selektivita redukce NO_3^- na vybraných slitinách. Jako perspektivní legující kovy byly zvoleny Sn, Zn a Pd. Analýza získaných dat ukázala, že všechny slitiny vykazují v jisté oblasti obsahu legujícího kovu pozitivní změny v kinetice redukce NO_3^- . U kovů se Zn a Pd navíc dochází k potenciálové separaci píků a proudové odezvy na prstencové elektrodě zde indikují také změny v selektivitě – tuto teorii je však ještě nutno ověřit vsádkovými elektrolyzami.

Vývoj keramických nosičů

Autor: Lenka Svobodová
Ročník: 5.
Ústav anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Filtrační porézní tělesa pro odstraňování aerosolů z plynných proudů, eventuálně pro použití jako nosičů aktivních látek či anorganických membrán jsou většinou připravována z čisté alfa-aluminy nebo sintrováním kovových materiálů. Ceny těchto materiálů jsou vysoké. Cílem této práce bylo připravit porézní tělesa, jejichž cena by byla řádově nižší.

Byly připraveny terčíky z korundové keramiky (velikost částic $0,4\ \mu\text{m}$) o průměru 25 mm litím suspenze do sádrových forem. Připravené terčíky vypálené při různých teplotách (1100°C , 1050°C , 1000°C , 960°C) byly charakterizovány pomocí permeačních metod (stanovení permeability průtokem vzduchu, stanovení velikosti maximálního defektu vytěsňováním kapaliny plynem tzv. "Bubble point metoda"), metodou rtuťové porozimetrie a rastrovací elektronovou mikroskopií (SEM).

ANORGANICKÉ NEKOVOVÉ MATERIÁLY I

Komise (ústav 107):

Prof. Ing. Josef Matoušek, DrSc. - předseda

Ing. Eva Gregorová – organizační tajemník

Doc. Ing. Václav Hulínský, Csc.

Soc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

Přihlášeno: 11 účastníků

Petra Bursíková

Lukáš Grič

Zoja Guschlová

Tomáš Jílek

Radka Kocourová

Ondřej Kolek

Martin Kopal

Marcela Poddaná

Světlana Rosková

Pavel Šlemín

Vladislava Tonarová

Vliv povrchových vrstev připravených metodou sol-gel na korozní chování křemičitých skel

Autor: Petra Bursíková
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Aleš Helebrant, CSc.
Konzultant: Ing. Jana Jiříčková

Povrchové vrstvy připravené metodou sol-gel mohou výrazně ovlivnit vlastnosti původního materiálu (optické, mechanické, chemické). Jednou z možností jejich využití je ochrana substrátů proti působení koroze. Práce studovala vliv anorganických povrchových vrstev na korozi mikroskopických podložních skel. Titaničité vrstvy byly nanесeny metodou dip-coating, výchozí sol byl připraven z tetra-n-butylorthotitanátu za použití isopropanolu, destilované vody a HCl (sol A) nebo kyseliny octové (sol B). Nanесený film byl po vysušení vypálen při teplotách 450 nebo 550°C. Mírou rozpouštění povrchových vrstev byla koncentrace SiO₂ v korozním roztoku měřena metodou AAS.

Nanесené titaničité vrstvy v alkalickém prostředí (výchozí pH=10,5) mírně zvýšily rozpouštění substrátu v porovnání s neupraveným sklem. Tyto výsledky lze vysvětlit poklesem pH roztoku na hodnotu 8,5 po několika hodinách koroze neupraveného skla. U skel s TiO₂ vrstvou se hodnota pH pohybovala v mezích 10,5-9,7. Přes vyšší rychlost rozpouštění vykazují vzorky s TiO₂ vrstvou menší vizuální poškození povrchu než sklo neupravené. V pufovaném roztoku (pH=7,7) je rozpouštění potaženého skla pomalejší vzhledem k neupravenému substrátu. Vyšší teplota výpalu titaničitých vrstev snižuje rychlost převodu SiO₂ do roztoku, typ kyseliny použité k přípravě výchozího solu tuto rychlost významně neovlivnil.

Teplotní stabilita iontově vodivých skel v soustavě Li₂O-WO₃-P₂O₅

Autor: Lukáš Grič
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Iontově vodivé materiály mají široké uplatnění např. v primárních a sekundárních bateriích, palivových článcích a elektrochemických senzorech, jako jsou třeba iontově selektivní elektrody. Velkou předností skelných iontových vodičů oproti krystalickým je izotropie jejich vlastností, absence fázového rozhraní a možnost kontinuální změny chemického složení.

Pro aplikace za vyšších teplot je důležitá znalost jejich teplotní stability. Po překročení transformační teploty dochází u tohoto typu skel obvykle k rekrytalizaci, což má většinou za následek zhoršení elektrické vodivosti a mechanické pevnosti. Proto bylo cílem práce sledování vlivu složení dobře iontově vodivých skel (10⁻⁴ S·m⁻¹ při 25°C) v soustavě Li₂O-WO₃-P₂O₅ na jejich vysokoteplotní stabilitu. Rekrytalizace připravených skel při teplotách 400-700°C byla sledována vysokoteplotní rentgenovou difrakční analýzou na difraktometru Brüker D8 vybaveném vysokoteplotní komůrkou. Růst krystalické fáze byl sledován při konstantní teplotě, jež byla předem určena diferenční termickou analýzou sledovaného skla.

Koroze skel s obsahem La určených pro dentální aplikace

Autor : Zoja Guschlová
Ročník : 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel : Ing. Lenka Jonášová
Konzultant: Ing. Helena Hradecká

Skloionomerní cementy (GICs) využívané v zubním lékařství na výplně a tmely jsou směsí jemně mletého křemičitého skla a vodného roztoku polykarboxylové kyseliny. Organická kyselina způsobuje částečné vyluhování iontů (převážně Na^+ , Ca^{2+}) ze skla. Tyto ionty reagují s karboxylovými skupinami kyseliny za vzniku solí, čímž dochází k zesíťování polymerních řetězců a tím i k tuhnutí cementů. Pokud jsou vyloužené ionty v přebytku, mohou zůstat v cementové matici volně bez vzniku solí. Při interakci cementů s vodným prostředím pak může docházet k vyluhování jednak iontů z částic skla a jednak „volných“ iontů z matrice cementu. Pokud by docházelo k úplnému vyluhování iontů ze skla, mohl by vznikat až gel SiO_2 , což by mohlo mít negativní vliv např. na pevnost cementů.

V práci bylo sledováno dlouhodobé rozpouštění skel s různým obsahem La (0-8%) ve vodných roztocích (pH 2 až 9) při 37°C. Ve výluzích byl stanoven Na, Ca, Si a La. Rozpouštění skel bylo porovnáváno s dlouhodobým rozpouštěním dentálního cementu připraveného ze stejného typu skla.

Vliv agresivního prostředí na vlastnosti geopolymérů (alkalicky aktivovaných popílků)

Autor: Tomáš Jílek
Ročník: 4.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

Při působení alkalických látek jako NaOH , Na_2CO_3 nebo Na_2SiO_3 na hydraulicky nebo latentně hydraulicky aktivní látky (slínek, strusky, popílků) vznikají hydratované aluminosilikáty sodno-vápenaté podobné zeolitům (geopolymery) typu $\text{M}_n[-(\text{Si}-\text{O})_z-\text{Al}-\text{O}]_n \cdot w\text{H}_2\text{O}$. Syntéza geopolymérů byla prováděna alkalickou aktivací směsi elektrárenského popílku (z el. Opatovice) a křemenného písku při teplotě 80 °C. Jako alkalický aktivátor byl použit roztok $\text{NaOH} + \text{Na}_2\text{SiO}_3$ v koncentraci 8-12% Na_2O a poměru $\text{SiO}_2 / \text{Na}_2\text{O}$ 1-1.3. 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 je velmi malá. Koroze agresivními roztoky bude sledována v časovém horizontu 1 roku.

Vliv složení skloviny na korozi molybdenových elektrod

Autor: Radka Kocourová

Ročník: 5.

Laboratoř anorganických materiálů, Ústav skla a keramiky.

Školitel: Ing. Jiří Matěj, CSc.

Byly měřeny klidové korozní potenciály molybdenové elektrody v roztavených sklovinách různého složení s použitím dvou různých referentních elektrod s kyslíkovou funkcí: jednoduché elektrody realizované platinovým drátem a elektrody s oxidem zirkoničitým o parciálním tlaku kyslíku daným rovnováhou Ni/NiO. Potenciál měřený proti zirkoničité elektrodě je reprodukovatelnější, rychleji se ustaluje a nezávisí na hloubce ponoření.

Potenciál molybdenové elektrody v modelové sodnovápenaté sklovině (74%SiO₂, 10%CaO, 16%Na₂O) se přidavkem různých čeriv posouvá ke kladnějším hodnotám. Největší posun je pozorován u skloviny čerené As₂O₃ a nejmenší při použití čeriva Na₂SO₄. U dvou sklovin s obsahem 24% oxidu olovnatého s obsahem a bez obsahu oxidu arsenitého nebyl pozorován posun ke kladnějším hodnotám vlivem oxidu arsenitého, ačkoliv bylo dříve popsáno výrazné snížení koroze.

V další části práce byly vyšetřeny dynamické polarizační křivky. V modelové sklovině čerené Sb₂O₃ a skloviny bez čeriv byl v anodické části nalezen průběh typický pro pasivaci elektrody. U skloviny čerené sulfátem se pasivace pravděpodobně narušuje uvolňovaným plynem.

Vliv složení substrátových skel na vlastnosti Ag⁺ planárních optických vlnodů

Autor: Ondřej Kolek

Ročník: 5.

Ústav skla a keramiky

Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Výsledky výzkumu skel s importovanými vlnovodnými vlastnostmi již našly uplatnění v celé řadě aplikací. Tyto vlnovody se využívají v optické komunikaci, v mnoha senzorech a uvažuje se i o dalším použití, například pro výrobu optických mikroprocesorů. Největším přínosem skleněných optických vlnodů je především kompatibilita s optickými vlákny, nízké náklady při výrobě, nízký útlum vedeného signálu a jednoduché začlenění do integrovaného systému.

Jednou z metod přípravy vlnodů v substrátových sklech je poměrně levná technika iontové výměny z taveniny. Optické vlastnosti vlnodů, jako jsou například hloubkový profil indexu lomu a počet vidů, závisí jak na podmínkách iontové výměny, tak na složení substrátového skla.

Tato práce sleduje vliv obsahu složek ZnO, MgO a CaO v základním hlinitokřemičitém skle na profil indexu lomu a počet vidů výsledného planárního vlnovodu. Suma molárního obsahu těchto oxidů je ve všech substrátech stejná, mění se pouze vzájemný poměr hořčíku, vápníku a zinku. Byla připravena řada pěti substrátových skel pro iontovou výměnu Na⁺ - Ag⁺, kde Na⁺ je ve skle nahrazován ionty Ag⁺, podílejících se na vzniku Ag⁺ planárního vlnovodu. Poté se proměřovaly optické vlastnosti připravených vlnodů a v práci je diskutován vliv složení substrátových skel na tyto vlastnosti.

Chemická odolnost skleněných glazur vůči vodným roztokům.

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

V práci bylo studováno korozní chování různých typů glazur vůči kyselému, neutrálnímu a zásaditému prostředí. Protože se jedná o skelné materiály s chemickým složením blízkým běžným sklům, lze předpokládat jejich obdobné chování a získané hodnoty lze porovnat s dříve získanými výsledky.

V experimentální práci byly použity normované zkoušky pro zjištění chemické odolnosti glazur. Jedná se o statické modelové testy, při kterých je povrchová vrstva glazury atakována vodnými roztoky kyselin, solí a zásad při teplotě 60°C. Dynamické testy spočívají v omývání glazovaného povrchu komerčně vyráběnými alkalickými detergenty v myčce nádobí.

Po provedení experimentů byly vzniklé vady (odprýskávání povrchových vrstev a usazování povlaků) zkoumány a vyhodnocovány optickým a elektronovým mikroskopem. U výluhů byla potenciometricky stanovována změna pH; obsah uvolněných iontů: Na^+ , K^+ , Ca^{2+} a SiO_2 byl určen metodou AAS.

Výsledky analýz byly porovnávány s výsledky pro různé typy skel (křemenné, obalové sklo, Simax atd.) uvedenými v literatuře. Na základě získaných výsledků je pak možno procesy vedoucí k poškození povrchu glazury zpomalit, nebo jim zcela zabránit.

Studium povrchu alkalických skel.

Autor: Marcela Poddaná
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: RNDr. Ondřej Gedeon, Ph.D.

Alkalická křemičitá skla vystavena tepelnému vlivu vykazují chemické změny ve své povrchové vrstvě. Analytické metody (elektronová mikroanalýza, fotoelektronová spektroskopie) ukazují, že za změny v povrchové vrstvě jsou hlavně zodpovědné alkalické ionty, jež jsou ve skle nejmobilnější.

Práce se zabývá studiem změny povrchové koncentrace alkalických iontů. Měření probíhá na vzorcích sodno-draselných křemičitých skel (o molárním složení: 5% Na_2O +10% K_2O + 85% SiO_2 a 10% Na_2O + 5% K_2O +85% SiO_2), které se zahřívají v elektrické peci s inertní atmosférou (argonová), aby nedošlo k ovlivnění výsledků vlivem vydušné vlhkosti.

Práce by měla pomoci objasnit, jak pouhá změna teploty ovlivňuje povrchovou koncentraci alkalických iontů.

Cauchyho stereologická věta a měření distribuce velikosti anizometrických částic

Autor: Světlana Rosková
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Willi Pabst

Měření distribuce velikosti částic má velký význam v nejrůznějších odvětvích průmyslu. Výsledky měření velikosti distribuce částic pro izometrické částice, měřené různými metodami, se liší pouze v rámci chyb měření, které odpovídají rozdílným fyzikálním principům jednotlivých metod. Mnohem výrazněji se liší výsledky měření pro anizometrické částice, což je způsobeno tím, že se měří ekvivalentní průměry a ne "skutečné" průměry (jsou definovány pouze pro částice kulovitého tvaru). Tento problém je akutní zejména pro keramický průmysl, protože právě anizometrické částice jsou zde jedním z hlavních předmětů zájmu (např. kaolin, jíly, keramická vlákna). Seriózní výpověď o rozdělení velikosti anizometrických částic předpokládá znalost jejich tvaru. Kvantitativní charakterizace tvaru je však možná pouze tehdy, volí-li se jednoduchý modelový tvar, např. válec nebo sferoid, a definuje se vhodný tvarový faktor. Teprve znalost tvarového faktoru dovoluje adekvátní interpretaci distribuce velikosti částic. Důležitou roli u anizometrických částic hraje také, kromě tvarového faktoru, orientace částic při měření. Cauchyho stereologická věta říká: „Při dostatečném počtu nahodile orientovaných, anizometrických, stejně velkých, konvexních částic je střední hodnota plošně ekvivalentního průměru rovna jedné čtvrtině povrchu těchto částic.“ Tato práce aplikuje Cauchyho stereologickou větu na problém měření distribuce velikosti částic mikroskopickou obrazovou analýzou.

Interakce skelných vláken s fyziologickým prostředím

Autor: Pavel Šlemín
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc.Ing. Aleš Helebrant CSc.
Konzultant: Ing. Alena Skrčená, Ing. Marie Nevšímalová

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 porovnat chemickou stabilitu vláken Sibal, Superwool a Saffil v prostředí simulované plicní tekutiny a destilované vody. Testované materiály byly podrobeny 1) statickým testům při 37°C ve fyziologickém roztoku (Modified Kanapilly Liquid – MKL) po dobu 19 a 35 dní a 2) statickým testům v deionizované vodě při teplotě 60°C s dobou expozice 1, 3 a 7 dní. Množství Ca^{2+} , SiO_2 a Al_2O_3 přešlé ze skla do roztoku v průběhu testu bylo stanoveno pomocí AAS. Rychlost rozpouštění, určená z časových závislostí převodu jednotlivých složek do roztoku, klesá v následujícím pořadí: Superwool > Saffil > Sibal. Materiály Saffil a Sibal přitom vykazují řádově vyšší chemickou stabilitu ve vodném prostředí v porovnání s materiálem Superwool. Dá se tedy předpokládat, že u těchto materiálů bude riziko karcinogenních účinků na lidský organismus vyšší.

Vliv parciálního tlaku vodní páry na těkání olovnatého skla

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

Ekonomickým, ale také ekologickým problémem při tavbě olovnatých křišťálů, v pecích otápěných zemním plynem, je mimo jiné vypařování těkavých složek z povrchu roztavené skloviny.

Tato práce je zaměřena na sledování hmotnostních úbytků olovnatého křišťálu při vysokoteplotní expozici v závislosti na parciálním tlaku vodní páry. Byly použity vzorky dvou skel s podobným chemickým složením, jež při předchozích stanoveních tepelné závislosti ztrát těkáním vykazaly rozdílné hmotnostní úbytky při vysokoteplotní expozici skel ve vlhkých atmosférách plynů. Měření jsou prováděna v atmosféře dusíku syčeného vodní parou. Teplota, průtok plynu i všechny ostatní podmínky zůstávají pro každý pokus stejné, měněn je pouze parciální tlak vodní páry.

Experimentální výsledky jsou prezentovány formou grafů, vyjadřujících závislost hmotnostních ztrát těkáním na parciálním tlaku vodní páry, pro taveniny dvou průmyslových skel typu olovnatého křišťálu.

ANORGANICKÉ NEKOVOVÉ MATERIÁLY II**Komise (ústav 107):****Doc. Ing. Martin Maryška, CSc. - předseda****Ing. Jana Andertová – organizační tajemník****Doc. Ing. Jaroslav Kutzendörfer, CSc.****Ing. Jaroslav Kloužek, CSc.****RNDr. Ondrej Gedeon, Ph.D.****Přihlášeno: 12 účastníků****Jan Demjan****Petr Fabián****Lukáš Hamáček****Patrik Hejna****Jan Hudeček****Petra Liptáková****Jiří Novák****Marek Novotný****Daniela Olšová****Petr Šíma****Jiří Vacek****David Zouhar**

Korundová keramika připravená litím s přímou koagulací

Autor: Jan Demjan
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.
Konzultant: Ing. Eva Týnová

Lití s přímou koagulací patří mezi techniky tvarování keramiky litím do neporézních forem. Tato metoda je založena na přímé koagulaci vysoce koncentrované stabilizované suspenze in situ pomocí její destabilizace vhodným koagulačním činidlem. Suspenze koaguluje při dosažení nulového ζ -potenciálu systému, čehož lze docílit posunem pH suspenze k jejímu isoelektrickému bodu ($IEP=0$) a/nebo zvýšením její iontové síly.

V předcházející práci byl navržen systém „ztekutivno-koagulační činidlo“, kdy vysoce koncentrovaná suspenze korundového prášku stabilizované pomocí sodné soli organické kyseliny byla destabilizována pomocí vhodně zvoleného koagulačního činidla. Cílem předkládané práce je nahradit použité ztekutivno ztekutivem bezalkalickým. Dvě bezalkalická ztekutiva jsou studována v systému s již dříve používaným koagulačním činidlem. Metoda je aplikována na přípravu korundové keramiky, tvarování je prováděno litím do kovových forem, k vlastní koagulaci suspenze dochází termickým rozkladem koagulačního činidla. Průběh koagulace je sledován měřením nárůstu viskozity systému v závislosti na čase. Připravená vypálená tělesa jsou charakterizována kritérii hutnosti.

Čeření sklovin oxidem ceričitým

Autor: Petr Fabián
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Čeřiva se přidávají do kmene pro podpoření odstranění rozpuštěných plynů, resp. bublin ze skloviny. Napomáhají čeření uvolňováním plynů a ovlivňováním důležitých technologických vlastností. Z technologicky nejvýznamnějších jsou to především povrchové napětí a viskozita. Na kvalitu čeření má velký vliv současně také její oxidačně-redukční stav.

Pro čeření olovnatých křišťálů se nejčastěji používají oxidy arsenu či antimonu v kombinaci s dusičnany; pro čeření užitkových sklovin síran sodný. Současný trend průmyslu mívá k ekologickým technologiím však hledá náhrady za tyto nebezpečné a škodlivé látky a snaží se snižovat jednak emise těžkých kovů, ale i oxidů dusíku a oxidů síry ze sklářských provozů. Jako jednu z možných náhrad lze použít oxid ceričitý. Při teplotách okolo 1400 °C se rozkládá a uvolňuje kyslík, který působí příznivě na čeření. Lze jej použít jako čistý CeO_2 (99,9 hmot.%) i jako směs s dalšími oxidy vzácných zemin ve formě koncentráту CeO_2 (98 hmot.%).

První fáze studia je zaměřena na možnost náhrady čeřicí kombinace $As_2O_3-KNO_3$ (resp. $Sb_2O_3-KNO_3$) pro 24%ní olovnatou sklovinu 99,9%ním oxidem ceričitým samotným nebo kombinovaným v čeřicí směsi s dusičnanem draselným.

Jedná se jednak o vyšetření možnosti použití samotného oxidu jako rovnocenné náhrady stávající čeřicí kombinace a optimalizaci jeho množství v kmeni, jednak o vyšetření jeho vlivu v kombinaci s optimalizovaným množstvím dusičnanu.

Je studován stupeň vyčeření sklovin v závislosti na přídavcích CeO_2 a KNO_3 . Kvalita čeření je posuzována na základě zjišťování počtu bublin ve 100 gramech utavené skloviny statickou metodou. U takto čeřených vzorků je proměřováno i povrchové napětí metodou maximálního tlaku v bublině a závislost viskozitní křivky na teplotě metodou bodu vnoření.

Cílem práce je ověřit možnost použití oxidu ceričitého jako rovnocenné náhrady za stávající čeřicí kombinace, optimalizovat jeho množství v kmeni a vyšetřit optimální přídavek KNO_3 .

Získaná data jsou porovnávána s parametry sklovin čeřených kombinacemi $As_2O_3-KNO_3$ a $Sb_2O_3-KNO_3$. Kvalita čeřicího procesu při použití oxidu ceričitého je diskutována z hlediska jeho pravděpodobného vlivu na čeřicí mechanismus.

Využití termovize pro verifikaci výkonových polí ve sklářských tavicích agregátech

Autor: Lukáš Hamáček
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Antonín Lisý, CSc.

Při elektrickém tavení skla je energie potřebná k ohřátí vsázky a utavení na sklovinu požadované teploty dodávána systémem elektrod. Výkonové pole závisí na umístění elektrod v peci a způsobu zapojení ke zdroji střídavého napětí. Cílem této práce je zjistit, zda teplota v jednotlivých místech na fyzikálním modelu odpovídá vybavenému výkonu. Pro tento účel byly vyrobeny modely z elektricky vodivé fólie, elektrody z naneseného stříbra připojeny ke zdroji napětí a teplota sejmuta termovizí. Teplotní pole byla porovnána vizuálně s vypočtenými výkonovými poli. Souvislost mezi teplotou a výkonem se potvrdila podle předpokladu a metodu termovizního sledování je možno využívat i pro účely modelování.

Příprava kompozitní keramiky $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ pro studium její povrchové degradace

Autor: Patrik Hejna
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.
Konzultant: Ing. Gabriela Tichá

Stabilizovaná zirkoničitá keramika může podléhat za určitých podmínek povrchové degradaci, která je způsobena přeměnou tetragonální fáze na monoklinickou. Na této degradaci se může podílet např. výše vypalovací teploty keramiky (ovlivňuje velikost zrn ZrO_2) nebo vnější podmínky působící na vlastní materiál (přítomnost vodní páry za zvýšené teploty a tlaku). Pozitivní vliv na potlačení této přeměny má přídavek Al_2O_3 .

Předkládaná práce je zaměřena na přípravu kompozitní keramiky na bázi $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ s obsahem Al_2O_3 0.25, 10 a 20 hm.%. K přípravě vzorků byla zvolena technologie lití vodných suspenzí do sádrových forem. Suspenze byly připraveny homogenizací v planetovém mlýnku typu Pulverisette 6 (Fritsch, Německo). Pomocí měření na rotačním viskozimetru RV1 (Haake, Německo) byly stanoveny tokové křivky a hledáno optimální množství ztekutiva pro dané typy suspenzí na základě stanovení ztekucovacích křivek. Ke ztekucení bylo použito bezalkalické ztekutivo Dolapix CE 64 (Zschimmer & Schwarz, Německo). Z připravených suspenzí byly zhotoveny vzorky ve tvaru tablet, které byly vypáleny na teploty 1490, 1510 a 1530 °C. Vzorky byly následně charakterizovány stanovením jejich objemové hmotnosti a zdánlivé pórovitosti. V další fázi práce bude na vypálených vzorcích s využitím RTG analýzy stanoveno zastoupení monoklinické a tetragonální fáze ZrO_2 .

Příprava a studium mechanických vlastností povrchově upravených keramických materiálů pro chirurgické aplikace

Autor: Jan Hudeček
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.

Práce se zabývá přípravou vodných ZrO_2 suspenzí a Al_2O_3 suspenzí pro nanášení povlaků na keramické kloubní implantáty metodou nástřiku tlakovým vzduchem a hodnocením vlivu nanesených povlaků na mechanické vlastnosti keramických materiálů. Povrchová úprava zlepšuje biokompatibilitu implantátu a umožňuje dosažení tzv. bezcementové fixace.

Z vybraných a připravených ZrO_2 , resp. Al_2O_3 suspenzí, byly tlakovým vzduchem nanесeny povlaky na vzorky pro testování mechanických vlastností. Hodnocení mechanických vlastností bylo v souladu s požadavky normy na hodnocení vlastností keramických chirurgických materiálů provedeno stanovením biaxiální pevnosti keramického materiálu. Hodnoty biaxiální pevnosti byly stanoveny u vzorků keramické korundové i zirkoničité matrice bez povlaku a s povlakem. Na základě provedených měření byl prokázán vliv povlaku na změnu mechanických vlastností, resp. biaxiální pevnosti keramického materiálu.

Pojiva na bázi odpadního $CaSO_4$

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

Zdrojem odpadního $CaSO_4$ v České republice jsou kromě minoritních ložisek přírodní sádrovce především odpadní sádrovce z chemických výroby a produkty odsiřování kouřových plynů. Tyto produkty lze zpracovat na pojiva kalcinací, hydrotermálními postupy nebo použít jako přísady do portlandských cementů. Základním nedostatkem pojiv na bázi $CaSO_4$ je jejich nízká odolnost vůči působení kapalné vody a relativně nízké pevnosti. Zvýšení odolnosti zatvrdlých pojiv na bázi α -a β - $CaSO_4 \cdot 1/2H_2O$ vůči kapalné vodě resp. prostředí s vysokou vlhkostí je „vnitřní“ hydrofobizace cestou vytvářením nerozpustných produktů jako je C-S-H fáze či ettringit na povrchu krystalů sádrovce. Tento postup vede k vytváření směsných pojiv α -a β - $CaSO_4 \cdot 1/2H_2O$ s hydraulicky aktivními látkami jako je portlandský cement, bílý portlandský cement, mletý popílek nebo mletá struska. Tato směsná pojiva vykazují zvýšený nárůst pevností v časovém horizontu 1 až 28 dnů a při uložení v prostředí s vysokou vlhkostí nedochází ke snížení pevností. V práci je řešen také problém ztekucování suspenzí těchto směsných pojiv přidávkou povrchově aktivních látek.

BUBBLING – intenzifikační prostředek procesu tavení skla

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

Bubbling (probulávání skloviny) vystupuje jako jedna z variant intenzifikace tavícího procesu ve sklářských tavících pecích. V práci byla provedena numerická simulace vlivů bubblingu na teplotní a rychlostní pole ve sklovině s využitím komerčního CFD programu Fluent. Navržená výpočetní síť obsahovala 180 000 buněk. Jako intenzifikační metoda, fyzikální podstaty, využívá bubbling rozdílu hustot injektovaného plynu a okolní roztavené skloviny. Při přenosu hybnosti mezi sloupcem bublin a taveninou byl brán zřetel na velikost, rychlost stoupání, frekvenci vývinu, výšku sloupce bublin a také na termofyzikální vlastnosti skloviny. Vzhledem k relativně vysokým rychlostem a krátkým dobám zdržení bublin ve sklovině byly zanedbány difúzní děje. Výsledky matematické simulace poukázaly, že bubbling má dopad na dění v celém bazénu pece. Mezi stěžejní patří zvýšená tepelná a mechanická homogenizace, nárůst přestupu tepla do skloviny event. snížení spotřeby paliva a snížení nebezpečně vysokých teplot pod klenbou.

Sol-gel vrstvy s obsahem stříbra

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

Cílem práce bylo připravit za použití metody sol-gel křemičité vrstvy obsahující nanočástice stříbra. Výchozí látkou pro tvorbu křemičitého skeletu vrstvy nanášené na povrch skla byl TEOS (tetraethoxysilan), který byl hydrolyzován v ethanolu za přítomnosti kyseliny dusičné. Jako zdroj stříbra byl použit dusičnan stříbrný, který se přidával ve formě vodného roztoku. Východiskem experimentů byly poznatky o přípravě a vlastnostech křemičitých vrstev s obsahem stříbra uveřejněné v odborné literatuře. Při ověřování těchto poznatků bylo zjištěno, že vrstvy vytvářené metodou sol-gel na skleněném substrátu jsou kompaktní, matné a bezbarvé. Množství ethanolu, vody a dusičnanu bylo proto dále postupně upravováno za účelem získání kvalitní žluté vrstvy. Žlutého zabarvení vrstev bylo dosaženo zvýšením koncentrace stříbra v solu a nalezením optimálních podmínek jeho přípravy. Dále bylo zjištěno, že intenzita zabarvení vrstvy roste s teplotou a dobou výpalu nanášených vrstev.

Kompozitní portlandské cementy s vysoce jemnými přísadami

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

Kompozitní portlandské cementy představují reálnou cestu pro snížení emisí CO_2 při výrobě portlandských cementů a pro využití řady anorganických odpadů. V práci byly studovány vlastnosti kompozitních portlandských cementů s přísadou vysoce jemných přísad jako jsou ocelářenské úlety (na skládkách ve střední Evropě deponováno více než 5 mil. tun), křemičité úlety resp. jemně mleté popílků. Ze studia mikrostruktury zatvrdlých kompozitních cementů s přísadou ocelářenských úletů vyplývá, že částice Fe_2O_3 jsou pevně zabudované ve hmotě C-S-H fáze, resp. jsou pokryté vrstvou $\text{Ca}(\text{OH})_2$. Částice Fe_2O_3 neovlivňují výrazně proces hydratace, pravděpodobně se svojí vysokou jemností podílí na nukleaci C-S-H fáze, podobně jako je tomu v případě křemičitého úletu a jemně mletých popílků. Příklad ocelářenských úletů do obsahu 5-10% v kompozitním cementu nesnižuje pevnosti a to ani v časovém horizontu 180 dní. Kritický parametr pro vlastnosti kompozitních cementů s přísadou ocelářenských úletů je obsah ZnO v úletu. Při vyšším obsahu ZnO v úletu dochází k výraznému zpomalení procesu hydratace kompozitního cementu.

Příprava výrobků z vláken se zvýšenou rozpustností ve fyziologických kapalinách

Autor : Petr Šíma
Ročník : 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel : Doc. Ing. Jaroslav Kutzendörfer, Csc.

Cílem práce bylo zlepšení technologie přípravy tepelně-izolačních výrobků z vláken se zvýšenou rozpustností ve fyziologických roztocích, tzv. „zelených vláken“ (přibližné chem. složení 63 hm.% SiO_2 , 31% CaO , 6% MgO).

Nejprve byla charakterizována použitá vlákna, tj. bylo stanoveno jejich chem. složení, měrný povrch a též množství a zrnitostní rozdělení granálií obsažených ve vláknech. Dále byl sledován především vliv množství přídavku organického pojiva na bázi styrenakrylátové disperze do vláknové suspenze a zkoumán vliv hlinitanu sodného na zlepšení rozpojení vláken a následné zvýšení mechanických vlastností. Kvalita výrobků byla vyhodnocována podle následujících kritérií: mechanická pevnost v tahu, ohebnost, obsah org. látek tj. ztráta žíháním, objemová hmotnost a měrná tepelná vodivost. Dosažené výsledky byly porovnány se shodnými testy, které byly provedeny na vzorcích běžně používaných hlinitokřemičitých vláken (hm. poměr $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ je cca 1/1).

Příprava korundové keramiky s řízenou pórovitostí

Autor: Jiří Vacek
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Jiří Havrda CSc.

Oxidová keramika na bázi Al_2O_3 je v současné době jedním z nejpoužívanějších materiálů pro náhradu lidských kostí. Důležitými vlastnostmi biomateriálů je kompatibilita s lidským organismem a pevná biologická fixace k lidské kostní tkáni. Z těchto důvodů je hlavním požadavkem přiblížit vlastnosti keramických materiálů k vlastnostem lidské kosti, které budou nahrazovat. Jedním z možných řešení je příprava korundové keramiky s řízenou pórovitostí tzn. s postupnou změnou pórovitosti a tím i vlastností v jednotlivých vrstvách.

Cílem mé práce je právě příprava funkčně gradientní keramiky na bázi Al_2O_3 . Použitou technologií přípravy je lití do sádrových forem. Příprava vrstevnaté keramiky závisí na délkových změnách jednotlivých vrstev, které probíhají při výpalu. Následkem velkých rozdílů v délkových změnách dojde během výpalu k zabudování napětí mezi vrstvami, které vedou k deformaci nebo až k destrukci materiálu. Snahou mé práce je sjednotit koeficienty délkové roztažnosti jednotlivých vrstev. Z těchto důvodů byl z publikovaných dat sestrojen matematický model pro přípravu vrstevnatých vzorků, přičemž jako počáteční odhad pro maximální přijatelný rozdíl v délkových změnách mezi vrstvami byla zvolena hodnota $\Delta\alpha = 2 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Lze předpokládat, že kromě rozdílů v délkových změnách hraje významnou roli rozložení pórů a tloušťka jednotlivých vrstev. Právě vliv těchto vlastností byl v mé práci studován.

Příprava a vlastnosti skleněných membrán pro filtraci plynů a kapalin

Autor: David Zouhar
Ročník: 5.
Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Václav Hulínský, CSc.

Práce se zabývá přípravou koherentních vysoce křemičitých skleněných membrán na bázi borosilikátového skla typu Vycor. Sklo se po utavení dále tepelně zpracovává nad transformačním intervalem kdy dochází spinodálním rozpadem k odmísení na dvě fáze, a to vysoce křemičitou a alkalicko-boritou. Vhodným složením skla a průběhem tepelného zpracování lze docílit odmísením vznik houbovitě struktury, kde obě fáze jsou spojitě a vzájemně propojené. Alkalickou fázi lze odleptat kyselinou chlorovodíkovou při teplotě okolo 100°C , čímž lze získat vysoce křemičitý křehký porézní skelet. Velikost vzniklých pórů lze regulovat v rozmezí desetin až desítek nanometrů.

KOVOVÉ MATERIÁLY

Komise (ústav 106):

Doc. Ing. Jitka Jandová, CSc. - předseda

Ing. Pavel Lejček, DrSc.

Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Ing. Luděk Joska, CSc.

Ing. Jiří Děd, CSc.

Ing. Šárka Msallamová – organizační tajemník

Přihlášeno: 12 účastníků

Vilém Bartůněk

Hana Čížová

Alena Doubková

Lenka Herzogová

Markéta Kropáčová

Dušan Majtás

Radka Malá

Miroslav Mičan

Michal Novák

Hana Synková

Petra Veconová

Jan Verner

Zpracování hlubokomořských konkrecí

Autor : Vilém Bartůněk

Ročník : 4.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel : Ing. Hong Vu, Ph.D.

Polymetalické hlubokomořské konkrece jsou perspektivní surovinou pro získávání neželezných kovů, zejména Co, Cu, Ni a Mn. Kromě těchto cenných kovů konkrece ještě obsahují poměrně vysoké množství Fe a ve stopovém množství další cenné kovy jako Mo, Ti, atd. Cílem práce bylo ověřit postup zpracování konkrecí, který by umožnil maximální extrakci zájmových kovů redukčním loužením v roztocích $\text{H}_2\text{SO}_4 - \text{FeSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ a následné oddělení železa. Loužení probíhalo za následujících podmínek: teplota 85°C , k:p = 15:1, stechiometrické množství FeSO_4 , 80% přebytek stechiometrického množství H_2SO_4 , doba loužení 3-4h. Za těchto podmínek se vyloužilo 98% Co, 98% Cu, 99% Ni a 98% Mn. Z výluhů bylo železo odstraněno ve formě NH_4 -jarožitu za podmínek: teplota 90°C , pH = 2, doba srážení 7 h. Tímto postupem bylo možno z roztoků odstranit více než 90% Fe. Získaný jarožit se dále zpracovával na magnetit, který je vhodnou surovinou pro výrobu feromanganu nebo oceli.

Identifikace historického kovového materiálu misky kahance

Autor: Hana Čížová

Ročník: 4.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Pro potřebu volby optimálního postupu restaurování byl identifikován kovový materiál misky kahance sochy horníka z výzdoby oltáře v kapli Panny Marie Bolestné při kostele sv. Jakuba Většího v Jihlavě. Miska měla ve stavu před restaurováním matný, špinavě žlutý vzhled zašlé mosazi. Při metalografické analýze odebraných vzorků byla na optickém mikroskopu sledována mikrostruktura naleptaných výbrusů, chemické složení základního kovu a pokovené vrstvy bylo semikvantitativně stanoveno na rastrovacím elektronovém mikroskopu, vybaveném energiově disperzním analyzátozem RTG záření. Miska kahance byla zhotovena z mosazného plechu o síle cca 0,3 mm a následně postříbřena, pravděpodobně amalgámovou technikou. Současnou konečnou povrchovou úpravou nátěrem na bázi vodního skla, plněného práškovým zlatem byla miska opatřena až po instalaci elektrického osvětlení. Nátěr pravděpodobně řešil vzhledové sjednocení po úpravách, spojených s montáží elektrického osvětlení kahance (instalace přívodní šňůry, objímky žárovky a vyvažovacího olověného závaží) a rovněž zlepšoval vzhled zkorodovaného a zřejmě pravděpodobně značně zčernalého postříbřeného povrchu.

Koroze ocelové výztuže v betonu při expozici ve vlhké atmosféře

Autor : Alena Doubková

Ročník : 5.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel : Ing. Radovana Malá

Vzorky výztuží z uhlíkové oceli se třemi různými výchozími stavy povrchu (obrobený, zokujený a předkorodovaný) byly v laboratoři exponovány v betonu s různým obsahem chloridů (0,0; 0,4 a 2,5 hmotn.% / cement), v atmosféře o různé relativní vlhkosti (60 až 100 %) po dobu osmi let. Byly srovnávány hodnoty korozní rychlosti získané z hmotnostních úbytků s hodnotami získanými elektrochemickým měřením (korozní potenciál a polarizační odpor). Průměrná korozní rychlost obrobené a zokujené oceli byla nižší než $1\mu\text{m/rok}$ v betonu s nízkým obsahem chloridů ($<0,4$ hmotn.% / cement). Předkorodovaná ocel vykazovala technicky nepřijatelnou průměrnou korozní rychlost ($> 1\mu\text{m/rok}$) za všech zvolených podmínek (i v nezkarbonatovaném betonu bez přítomnosti chloridů). Pro hodnocení korozní aktivity pro předkorodovaný povrch není vhodná metoda korozního potenciálu, protože výsledky nebyly v souladu s výsledky metody polarizačního odporu a výpočtem korozní rychlosti z hmotnostních úbytků.

Studium fázových přeměn u Cu-slitin s tvarovou pamětí

Autor: Lenka Herzogová

Ročník: 1.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Pavel Lejček, DrSc.

Pojem „tvarová paměť“ se používá pro proces, při kterém je materiál plasticky deformován při určité teplotě a po zahřátí přechází do původního tvaru (který měl před deformací) v důsledku martenzitické transformace. V současné době materiály s tvarovou pamětí nacházejí uplatnění např. v medicíně (stenty, drátky v permanentních rovnátkách, chirurgické nástroje), ale lze se s nimi setkat i v předmětech každodenní potřeby (termostaty kávovarů, antény mobilních telefonů, obroučky brýlí). Cílem této práce bylo zmapovat fázové transformace v monokrystalech Cu-slitin s tvarovou pamětí o chemickém složení Cu-11,5%Al- 6,7%Mn a Cu-14%Al-4%Ni. Pro obě slitiny byla podle literárních zdrojů spočítána přibližná teplota počátku vzniku martenzitu (M_s). Ve slitině obsahující 6,7%Mn martenzit začíná vznikat při teplotě cca -20°C , proto byl tento vzorek ochlazen pod tuto teplotu a na optickém mikroskopu byla při samovolném ohřívání vzorku na pokojovou teplotu pozorována transformace martenzit $\rightarrow$ austenit. V případě slitiny obsahující 4%Ni teoretická M_s odpovídá teplotě 135°C , proto byla slitina v peci ohřátá na 150°C a při ochlazování byla sledována přeměna austenit $\rightarrow$ martenzit. Oba přechody byly zachyceny a analyzovány pomocí obrazového analyzátoru Lucia.

Odolnost slitin AlMn v chloridovém prostředí.

Autor: Markéta Kropáčová

Ročník: 4.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Radovana Malá

Hliník a jeho slitiny jsou v podmínkách, kdy dochází ke zvýšené kontaminaci chloridovými ionty, náchylné k bodové korozi. Typickým příkladem jsou součásti automobilů vystavené působení vlhkosti na silnicích, kde zdrojem chloridů jsou posypové soli nebo mořská voda. S cílem posoudit korozní odolnost slitin určených pro tepelné výměníky automobilů, byly - jako dílčí úkol - v laboratorních podmínkách srovnávány slitiny AlMn1 (AA3003), AlMn1Si0,9 a AlMn1Zn1,5, a to jak ve výchozím stavu, tak i po tepelném zpracování (žihání s velmi rychlým náběhem na 600°C za 2 až 5 minut). Pro orientační posouzení náchylnosti k bodové korozi byl měřen samovolný korozní potenciál v chloridovém roztoku (pH 3,5). Dále byla pomocí zkoušky síranem měďnatým stanovena kvalita oxidických vrstev na sledovaných slitinách. Na základě těchto výsledků bylo možné orientačně rozlišit korozní odolnost Al slitin a upřesnit metodiku zkoušek.

Hydrometalurgické zpracování Sn-stěrů z kyslíkové rafinace surového olova

Autor: Dušan Majtás

Ročník: 5.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Romana Janů

V práci byla zkoumána možnost selektivního oddělení cínu z alkalických roztoků po zpracování Sn-stěrů z kyslíkové rafinace surového olova. Cín obsažený ve stěrech brání jejich využití jako sekundárního zdroje pro výrobu olova. Stěry byly taveny s NaOH, následným loužením ve vodě vznikly roztoky obsahující Pb, Sb a Sn. Cín byl získáván z roztoku v podobě komerčně využitelného CaSn(OH)_6 . Ke srážení bylo použito dvou činidel: CaCO_3 a $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Byl zkoumán vliv typu srážedla a jeho stechiometrického přebytku, teploty srážení, velikosti zrna a specifického povrchu použitého srážedla na precipitační účinnost cínu z roztoku. Jako nejvhodnější se jeví použití síranu vápenatého při 40°C a při stechiometrickém množství srážedla.

Využití oscilační potenciálového signálu pro studium koroze

Autor: Radka Malá

Ročník: 1.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Luděk Joska, CSc.

Užitečným nástrojem studia koroze ve vodných prostředích jsou elektrochemické metody – měření samovolného korozního potenciálu, potenciodynamických závislostí atd. Hodnota samovolného korozního potenciálu snímaného analogově či digitálně s nízkou frekvencí (méně než 1Hz) dává informaci o okamžitém stavu systému a pravděpodobnosti koroze. V případě pasivních materiálů však nemusí takto zaznamenávaný samovolný korozní potenciál informovat o možném nebezpečí vzniku lokální, např. bodové koroze. V uvedeném případě může být užitečné sledování dynamických změn potenciálu (studium tzv. potenciálového šumu) při snímkovacích frekvencích vyšších než 1Hz. V práci je porovnáno chování hliníku v různých prostředích na základě hodnocení časových závislostí samovolného korozního potenciálu a úrovně potenciálového šumu za stejných podmínek. Střídavá složka měřeného signálu citlivě reaguje na změnu podmínek vedoucích ke vzniku bodové koroze.

Karbidické fáze v nástrojové oceli legované niobem

Autor: Miroslav Mičan

Ročník: 5.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jan Šerák, PhD.

Cílem práce bylo vyhodnotit morfologii a strukturu karbidických fází přítomných v PM-nástrojové oceli se zvýšeným obsahem niobu po různých režimech tepelného zpracování. Struktura tepelně zpracované PM-nástrojové oceli byla analyzována pomocí optické mikroskopie, transmisní elektronové mikroskopie (TEM) a elektronové difrakce.

Ocel v kaleném stavu je tvořena martenzitem, zbytkovým austenitem a primárními karbidy typu MC, M_7C_3 . Při popouštění na sekundární tvrdost dochází k precipitaci velice jemných karbidů typu MC, M_2C a M_6C a k transformaci zbytkového austenitu na martenzit.

Struktura a vlastnosti ledeburitických nástrojových ocelí

Autor: Michal Novák

Ročník: 1.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Pavel Novák

Cílem práce je srovnání nástrojové oceli legované niobem (2,6 hmotn.%), připravené technologií práškové metalurgie a dvou obdobných komerčních nástrojových ocelí bez obsahu niobu, vyrobených klasickou technologií. Klasické oceli byly v litém stavu, dále pak kované s následným žíháním na měkko, kalením a popouštěním. Byla hodnocena mikrostruktura, tvrdost a odolnost proti abrazivnímu opotřebení ve všech fázích zpracování. Analogicky byly sledovány vlastnosti kompaktizovaného materiálu po tepelném zpracování. PM ocel legovaná niobem, připravená z rychle ztuhlých částic, vykazuje rovnoměrnější distribuci karbidů a vyšší efekt sekundárního vytvrzení při popouštění.

Hydrometalurgické zpracování odpadů ze žárového zinkování

Autor: Hana Synková

Ročník: 5.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Petr Dvořák

Stěry ze žárového zinkování jsou směsí zinku, oxidu zinečnatého (vzniká oxidací roztaveného Zn na povrchu lázně) a dalších sloučenin, které tvoří Zn s látkami používanými jako leskutvorné a jiné přísady. Stěry se z lázně periodicky odstraňují a hromadí se jako odpad. Ten není v ČR zpracováván, buďto je ukládán na skládky nebo posílán na přepracování do zahraničí. Z hlediska svého poměrně značného obsahu Zn se jeví jako jeho vhodná surovina. Byly studovány podmínky maximální extrakce zinku při loužení stěrů v roztocích HCl a H₂SO₄. Následně byla řešena rafinace získaných výluhů směřující k odstranění nežádoucích nečistot a tím získání čistých roztoků, vhodných k vysrážení ZnCl₂ (výluhy po loužení v HCl) nebo pro přímé elektrolytické získávání zinku (výluhy po loužení v H₂SO₄).

Stanovení agresivity roztoků používaných pro elektrochemické čištění korozivzdorných ocelí.

Autor: Petra Veconová

Ročník: 1.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

Povrch korozivzdorných ocelí se při zvýšených teplotách pokrývá ve vodném prostředí nebo na vzduchu vrstvou oxidů. K jejich odstraňování jsou používány různé chemické i elektrochemické postupy. Při této operaci, však může dojít, kromě odstranění nežádoucí povrchové vrstvy oxidů i k napadení základního materiálu. Elektrochemický postup čištění byl ověřován u austenitické korozivzdorné oceli FeCr18Ni10Ti, polarizované až do proudových hustot $20 \text{ kA}\cdot\text{m}^{-2}$ v roztocích obsahujících v různém poměru kyselinu šťavelovou a citrónovou. Náboj prošlý během procesu byl porovnáván s hmotnostními úbytky zpracovávané oceli, současně byl dokumentován povrch při zvětšení až 500 $\times$. Při nízkých anodických proudových hustotách bylo pozorováno napadení povrchu oceli mimo hranice zrn, při vyšších proudových hustotách a nízkých intenzitách vylučování kyslíku dochází k napadení hranic zrn. Na základě výsledku zkoušek byly určeny optimální podmínky elektrochemického opracování povrchu.

Vlastnosti rychle ztuhlých slitin hliníku

Autor: Jan Verner

Ročník: 5.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Cílem práce je popis mikrostruktury slitin AlCr_{5,7}Fe_{1,7}Si₁ a AlCr_{5,6}Fe_{2,2}Si_{0,8}Ti_{1,4}, které byly připraveny ve formě prášku atomizací tlakovým dusíkem. Získaný materiál byl na sítích rozdělen do jednotlivých frakcí: 0-25, 25-45, 45-63, 63-100 a 100-125 μm . Práškové vzorky byly hodnoceny metalograficky a u jednotlivých frakcí změřen plošný podíl precipitátů a mikrotvrdost. Mikrostruktura a plošný podíl částic byly vyhodnoceny pomocí optického mikroskopu Olympus PMEÚ a programu LUCIA. Výsledky měření ukazují, že s klesající velikostí částic roste plošný podíl precipitátů v částici. RTG difrakční analýza zjistila ve slitinách přítomnost precipitujících fází Al₉₅Fe₄Cr, Al₈₆Fe₁₄, Al₇₄Cr₂₀Si₆, Al₈₀Cr₂₀.

CHEMIE A TECHNOLOGIE POLYMERŮ**Komise (ústav 112):**

Doc. Ing. Vladimír Maroušek, CSc. - předseda

Ing. Petr Hron, CSc.

Ing. Zdenka Vymazalová, CSc.

Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Ing. Zdeněk Hroch - organizační tajemník

Přihlášeno: 14 účastníků.

Zdeněk Hrdlička

Eliška Chánová

Miroslav Koudela

Irena Kroutilová

Richard Laga

Jiří Mařík

Kamila Pazderová

Jakub Peter

Lenka Plchotová

Robert Pola

Markéta Putnierzová

Jan Tolar

Jiří Vitásek

Martin Žák

Vliv kapalných polybutadienů na vulkanizaci a vlastnosti vulkanizátů SBR

Jméno: Zdeněk Hrdlička
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Součástí receptury kaučukových směsí bývají minerální oleje. Jejich úkolem je snížit energii potřebnou ke hnětení směsí, usnadnit zamíchání plniv a také snížit modul a zvýšit mrazuvzdornost vulkanizátu. Ve firmě Kaučuk Kralupy, a.s. se vyrábějí nízkomolekulární kapalně polybutadieny (LB), které jsou tuto úlohu též schopny splnit. V literatuře se objevují úvahy o jejich možné účasti na tvorbě sítě při vulkanizačních reakcích. Zda je tomu tak, je předmětem této práce.

Energie potřebná k zamíchání směsi SBR obsahující 40 dsk aktivního SiO_2 se přídavkem LB snížila, například o 12 % při obsahu 10 dsk LB.

Základním kritériem pro hodnocení účasti LB na tvorbě sítě bylo stanovení obsahu rozpustného podílu (solu) ve vulkanizátu. Bylo zjištěno, že přídavek 10 % kapalně polybutadienu způsobil zvýšení obsahu solu jen zhruba o 4 %, což potvrzuje, že se kapalně polybutadien zabudovává do sítě vulkanizátu.

Přídavek LB se u vulkanizátů projevil snížením modulu a pevnosti v tahu a zvýšením tažnosti.

Polyimid-polysiloxany plněné zeolity

Autor: Eliška Chánová
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Ing. Petr Sysel, CSc.

Aromatické polyimidy (PI) vykazují velmi dobrou chemickou i mechanickou stabilitu při teplotách do 250°C . Jsou používány v (mikro)elektronice, leteckém průmyslu a jako separační membrány. Neporézní polyimidové membrány vykazují vysoký separační faktor pro směsi plynů, ale nízké propustnosti jak pro plyny, tak pro páry organických látek. Nadějnou cestou ke zvýšení propustnosti je začlenění (mikro)porézního materiálu (např. zeolitu) do polymerní matrice. V případě polymerů ve skelném stavu (tj. i PI) je však problémem špatná adheze mezi oběma fázemi, u polymerů s flexibilními řetězci (např. polysiloxanů) je tento nedostatek potlačen. V této práci byla studována příprava a vlastnosti plněných materiálů na bázi PI modifikovaných polysiloxany a zeolitu (Silikalit-1). Byly syntetizovány polyimid-polysiloxanové kopolymery s řízenou molární hmotností $M_n=40000 \text{ g.mol}^{-1}$. K jejich přípravě byl použit polyimidový oligomer s teoretickou $M_n=6000 \text{ g.mol}^{-1}$, na bázi dianhydridu bis(3,4-dikarboxyfenyl)etheru a 1,4-bis(4-amino-1,1-dimethylbenzyl)benzenu terminovaný 2-aminopyridinem, a aminopropyl-terminovaný poly(dimethylsiloxan) s teoretickou $M_n=5000$ a 3000 g.mol^{-1} . Do roztoků kopolymerů byl zamíchán Silikalit-1 (velikosti částic $20 \mu\text{m}$) a byly vytvořeny tenké filmy. U připravených materiálů byla studována mezifázová adheze (SEM), dostupnost kanálů zeolitu (metodou sorpce jodu), propustnost pro směs vodík-isobutan a termická stabilita v závislosti na složení kopolymerů a obsahu zabudovaného Silikalitu-1.

Polymerace dodekano-12-laktamu účinkem MgBr_2

Autor: Miroslav Koudela
Ročník: 3.
Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Ačkoli se Grignardovy sloučeniny osvědčily jako iniciátory polymerace hexano-6-laktamu (6-HL), nebyly v literatuře publikovány údaje o polymeraci dalších laktamů účinkem podobných iniciačních systémů.

Je známo, že ethylmagnesiumbromid nebo hexano-6-laktammagnesiumbromid podléhají za podmínek polymerace disproportionační reakci. Produkty této reakce jsou laktamát hořečnatý a bromid hořečnatý. Proto byl MgBr_2 zvolen jako modelová sloučenina pro iniciaci polymerace dodekano-12-laktamu (12-DL).

V práci byl sledován průběh polymerace 12-DL iniciované 0,5 a 1 mol% MgBr_2 při teplotě 280°C. Bylo zjištěno, že polymerace iniciovaná MgBr_2 probíhá rychleji než klasická hydrolytická polymerace 12-DL. Součástí práce byla rovněž molekulární charakterizace kopolymerů 6-HL a 12-DL připravených již dříve za iniciace MgBr_2 . Pro ověření předpokládané koordinace sloučenin hořčíku k amidové skupině laktamu či lineárních molekul vznikajícího polyamidu byla syntetizována komplexní sloučenina 12-DL s MgBr_2 .

Mechanochemická regenerace pryže

Autor: Irena Kroutilová
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Antonín Kůta, CSc.

Pryžovou drť lze regenerovat řadou postupů: mechanicky, částečným rozpuštěním, chemicky, plamenem, ultrazvukem, mikrovlnami a mikroorganismy. V této práci byla zvolena metoda mechanické regenerace, a to na laboratorním dvouválci bez přídavku nebo s přídavkem činidel. Byla použita následující činidla: Vulkacit Thiuram (tetramethylthiuramdisulfid), Peptazin BAFD (o,o'-dibenzamidodifenylsulfid) a HB-20 (minerální olej). U regenerovaného materiálu byla změřena viskozita Mooney, viskoelastické chování v závislosti na době odležení a vulkanizační schopnost a stanoveny mechanické vlastnosti vulkanizátů.

Z hlediska viskozity Mooney se projevil jako nejúčinnější přídavek 10% oleje. Viskoelastické vlastnosti měřené na přístroji SRPT jsou charakterizovány pomocí veličin K a a . Hodnota parametru K během prvních třech dnů obvykle klesá a dále se již výrazně nemění. Hodnota parametru a klesá s dobou odležení, největší pokles byl zaznamenán také během prvních třech dnů.

Modifikace poly(3-hydroxybutyrátu)

Autor: Richard Laga
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Ing. Jiří Brožek, CSc.

Poly(3-hydroxybutyrát) (PHB) je příkladem biodegradabilního termoplastu, který by mohl v budoucnosti v oblasti obalových materiálů částečně nahradit některé petrochemické polymery, zejména polypropylen. V současné době jeho aplikaci v praxi brání několik faktorů - především jeho vysoká cena a rychlá termická degradace v blízkosti teploty tání. Existuje několik postupů, vedoucí ke zlepšení zpracovatelnosti PHB, jednou z možností je jeho chemická modifikace.

K modifikaci PHB byl využit ϵ -kaprolakton, poly(ϵ -kaprolakton) a poly[(ϵ -kaprolakton)-co- (ϵ -kaprolaktam)]. Reakce byly prováděny v roztoku, v teplotním rozmezí 120-150°C; katalyzátory transesterifikačních popř. transamidačních reakcí byly sloučeniny na bázi Mg, Zn a Sn. Takto modifikovaný kopolymer byl charakterizován termickými metodami (DSC, TGA).

Příprava hydrofobních materiálů na bázi silikonového kaučuku

Autor: Jiří Mařík
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Ing. Petr Hron, CSc.

Organokřemičité sloučeniny se dnes hojně používají pro klinické, biochemické a farmaceutické účely. Výrobky ze silikonové pryže jsou biologicky inertní, netoxické a tak našly uplatnění v chirurgii v podobě implantátů. Charakteristickým rysem těchto materiálů je hydrofobita. Byla prokázána souvislost mezi vlastnostmi povrchu použitého materiálu a tvorbou bakteriálního a kvasinkového filmu, který je často nežádoucí a degraduje funkci protézy. Jedním z hlavních faktorů ovlivňující adhezi buněk k nosiči je právě hydrofobita povrchu, a to jak nosiče tak i buněk. Proto je vhodné stupeň hydrofobity upravovat. Pro výběr vhodného materiálu je nutné přihlédnout i k vlastnostem adherujícího mikroorganismu. V našem případě bylo snahou vytvořit materiály s co největší hydrofobitou povrchu. Jako základní surovina, určená pro modifikace byl použit methylvinylsiloxa-nový polymer a α,ω -dihydroxypolydimethyl siloxan. Stupeň hydrofobity byl zjišťován měřením kontaktních úhlů kapalin na povrchu.

Tepelná stabilizace PVC

Autor: Kamila Pazderová
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Ing. R. Kalousková, CSc.

Sloučeniny olova, přes snahy omezit používání zdraví škodlivých aditiv, stále zaujímají významné místo mezi stabilizátory PVC. Jedna z cest jak omezit množství nežádoucího kovu v polymeru je kombinace těchto stabilizátorů s ekologicky i ekonomicky přijatelnými sloučeninami, které zachovají žádané zpracovatelské a mechanické vlastnosti výsledných směsí.

Práce je příspěvkem ke studiu působení stabilizačního systému obsahujícího malé množství stearanu olovnatého a akceptorů HCl na bázi epoxidovaného oleje a syntetického hydrotalcitu v tepelně namáhané neměkčené směsi PVC. Získané výsledky ukazují, že kombinace těchto aditiv zajistí srovnatelnou tepelnou i barevnou tepelnou stabilitu směsi PVC jaké bylo dosaženo při stabilizaci PVC několikanásobně vyšším množstvím samotného stearanu olovnatého.

Vysoce větvené polyimidy

Autor: Jakub Peter
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Ing. Petr Sysel, CSc.

Aromatické polyimidy (PI) vykazují všestrannou odolnost i za zvýšených teplot (do 200 °C). Jsou používány v (mikro)elektronice, leteckém průmyslu a jako separační membrány. Lze se domnívat, že dalšího zlepšení transportních vlastností pro plyny by mohlo být dosaženo použitím membrán na bázi vysoce větvených místo lineárních PI. Vysoce větvené polymery zahrnují ve své struktuře kavity (o velikosti desetin nm), které ovlivňují volný objem a mohou sloužit jako cesta pro transport médií skrze membrány na jejich bázi. V této práci byly syntetizovány vysoce větvené PI na bázi difunkčního bis(3,4-dikarboxyfenyl)etheru a trifunkčního 2,4,6-triaminopyrimidinu. Polyimidové prekurzory (polyamid-karboxylové kyseliny) byly charakterizovány limitním viskozitním číslem. Byla studována morfologie, termická a chemická stabilita a filmotvornost připravených materiálů v závislosti na poměru použitých složek (tj. i typu koncových skupin) a způsobu přípravy (zejména typu imidizace).

Testování biologické rozložitelnosti kopolyesterů na bázi odpadního polyethyltereftalátu, 1,2-ethandiolu a kyseliny adipové

Autor: Lenka Plchotová
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Byla testována biologická rozložitelnost alifaticko-aromatických kopolyesterů připravených chemickou modifikací odpadního polyethyltereftalátu.

Drť z použitých nápojových lahví byla glykolyzována za teploty 250 °C a produkt glykolýzy byl poté kondenzován s kyselinou adipovou. Z kopolyesterů byly připraveny fólie o tloušťce 0,20-0,25 mm. Ve spolupráci s MBÚ AV ČR byly tyto fólie podrobeny jednak kompostovacímu testu, jednak byly inkubovány v tekutých médiích zaočkovaných ligninolytickou houbou *Irpelex lacteus* (kmen 617/93) při 26 °C. Fólie byly vystaveny vlivu kompostu a hub po dobu 6-ti týdnů.

Změny povrchu fólií po degradaci byly sledovány pomocí elektronového mikroskopu. Viskozimetrickým měřením roztoků původních a degradovaných fólií byly zjištěny změny v molekulové struktuře degradovaných fólií kopolyesterů. Pro charakterizaci termického chování kopolyesterů byla využita metoda DSC.

Pevné elektrolyty na bázi polyamidu 6 a LiCl

Autor: Robert Pola
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Ing. Jiří Brožek, CSc.

Byly studovány možnosti přípravy pevných elektrolytů na bázi poly(ϵ -kaprolaktamu) a poly(ϵ -kaprolaktamu)-*blok*-poly(oxyethylenu) a LiCl. K přípravě elektrolytů bylo využito aniontové polymerizace ϵ -kaprolaktamu (CL) v přítomnosti LiCl resp. α,ω -diaminopoly(oxyethylenu). Polymerace byly iniciovány sodnou solí CL a aktivovány hexamethylendiisokyanátem blokováným CL. Připravené materiály byly charakterizovány stanovením obsahu nezreagovaného CL pomocí GLC, měřením vodivosti a termickými metodami (DSC, TGA).

Modifikace směsí PP/PA11

Autor: Markéta Putniorzová
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Ing. Jan Šimek, CSc.

V práci byl zkoumán vliv kompatibilizace směsí PP/PA11 na jejich vrubovou houževnatost. Směsi byly hodnoceny z hlediska mísitelnosti pomocí hodnot T_g a T_m získaných z DMA a DSC. Též byly zkoumány a posuzovány lomové plochy směsí pomocí elektronové mikroskopie. Rozhodujícím faktorem pro zvýšení vrubové houževnatosti byl přídavek elastického kompatibilizátoru PEBAX.

Polymerace oktano-8-laktamu: srovnání iniciační účinnosti CaBr₂ a MgBr₂

Autor: Jan Tolar
Ročník: 4.
Ústav polymerů
Školitel: Doc.Ing. Irena Prokopová, CSc.

Sloučeniny hořčíku se v poslední době ukázaly jako vhodné iniciátory polymerace hexano-6-laktamu. Vysoká účinnost těchto iniciátorů je připisována koordinačním schopnostem atomů Mg.

V této práci byl sledován iniciační účinek MgBr₂ na polymeraci oktano-8-laktamu (OL). Tento laktam má zvláštní postavení v homologické řadě laktamů. Devítičlenný cyklus OL se vyznačuje vysokým pnutím a tvoří předěl mezi laktamy s nižším počtem atomů uhlíků, kde je amidová skupina v cis-konformaci a tzv. vyššími laktamy s trans konformací amidové skupiny.

Byla stanovena i závislost polymeračního stupně vznikajícího polyamidu na době polymerace a koncentraci iniciátoru (0,2 mol %, 0,5 mol % a 1 mol %). Zároveň byla porovnána účinnost iniciace MgBr₂ a CaBr₂ při stejných dobách polymerace a koncentraci iniciátoru (0,5 mol%). Koordinační schopnost atomů Mg k primárním aminoskupinám, které jsou koncovými skupinami makromolekul polyamidu byly ověřovány syntézou modelového komplexu MgBr₂ s 6-aminohexanovou kyselinou.

Komplexy hexano-6-laktamu se sloučeninami hořčíku a vápníku

Autor: Jiří Vitásek
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

V literatuře jsou popsány stovky komplexních sloučenin různých laktamů s anorganickými solemi. Překvapivě málo pozornosti bylo dosud věnováno komplexům sloučenin hořčíku s laktamy. Tento typ koordinačních sloučenin je zajímavý především proto, že koordinačními efekty atomu hořčíku k amidové skupině a dalším funkčním skupinám lineárních molekul polyamidu jsou vysvětlovány zvláštnosti polymerace hexano-6-laktamu (HL) iniciované ethylmagnesiumbromidem nebo hexano-6-laktammagnesiumbromidem. Pro porovnání s dříve připraveným komplexem HL s MgBr_2 byl připraven a charakterizován podobný komplex s MgCl_2 . Dále byly syntetizovány a charakterizovány komplexy HL s CaCl_2 a CaBr_2 . Vliv typu centrálního atomu kovu v komplexech na jejich schopnost iniciovat polymeraci HL byl ověřen v sérii polymeračních testů. Na základě viskozimetrických měření roztoků polymerů připravených za iniciace sloučeninami hořčíku nebo vápníku byla porovnávána jejich molekulová struktura.

Povrchová modifikace hydroxyapatitu organofunkčními silany

Autor: Martin Žák
Ročník: 5.
Ústav polymerů
Školitel: Ing. Petr Hron, CSc.

Silikonový kaučuk patří mezi inaktivní biomateriály. Jeho biologickou aktivitu lze ovlivnit použitím bioaktivního plniva (hydroxyapatitu) při přípravě kompozitního materiálu. Důležitou skupinou látek používaných pro povrchové úpravy plniv jsou organofunkční silany. V této práci byl použit vinyltrimethoxysilan. Organofunkční silany se používají pro zlepšení dispergace plniva a ke zvýšení adheze na fázovém rozhraní polymer – plnivo. Tím dochází ke zlepšení mechanických vlastností polymerních kompozitních materiálů. Methoxy skupiny se u vinyltrimethoxysilanu snadno hydrolyzují za vzniku silanolových skupin. Tyto skupiny kondenzují s hydroxylovými skupinami na povrchu plniva. Na povrchu plniva jsou pak vázány vinylové funkční skupiny, které jsou schopné reagovat s polymerní maticí. Ke zjištění navázání silanu na povrch hydroxyapatitu byla provedena RTG difrakční analýza.

MATERIÁLOVÉ INŽENÝRSTVÍ**Komise (ústav 126)**

Doc. Ing. Jindřich Leitner, DrSc. - předseda

Doc. Ing. Petr Macháč, CSc. – organizační tajemník

Doc. RNDr. Vladimír Rybka, DrSc.

Dr. Ing. David Sedmidubský

Ing. František Kovanda, CSc.

Přihlášeno: 7 studentů

Michal Blaha

Petr Maršík

Tomáš Rojka

Petr Slepíčka

Helena Švomová

Martina Urbanová

Martin Žilka

Charakterizace magneto-optických vrstev pro nedestruktivní diagnostiku

Autor: Michal Blaha

Ročník: 5.

Ústav inženýrství pevných látek

Školitel: ing. Pavel Novotný, CSc

Bylo zkoumáno větší množství vzorků z monokrystalu granátu s cílem najít vhodné vrstvy pro aplikace v oblasti nedestruktivní diagnostiky materiálů. U každého vzorku byla zjišťována hlavně homogenita, přítomnost kolmé doménové struktury, perioda a Faradayův kontrast. V případě uspokojivých vlastností byla měřena závislost parametru AF (area fraction) na velikosti stacionárního magnetického pole kolmého na rovinu vzorku a v jeho rovině. Pro aplikace je optimální magneto-optická vrstva, která vykazuje v jednom směru vysokou citlivost a současně "necitlivost" ve směru kolmém.

U třech nejlepších vzorků byla zjišťována jejich odezva na trhlinu v austenitovém bloku. Dále byla sledována odezva na uměle vytvořený defekt v kuprexitu protékaném stejnosměrným proudem. Tyto vzorky budou využity pro metodu vířivých proudů v kombinaci s magneto-optickým jevem.

Měření tepelné kapacity InN

Autor: Petr Maršík

Ročník: 5.

Ústav inženýrství pevných látek

Školitel: Doc.Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Cílem této práce je určit tepelnou kapacitu a její závislost na teplotě InN wurtzitové struktury v oboru teplot 473 – 773 K s krokem 50 K. K tomuto účelu byl použit vysokoteplotní kalorimetr SETARAM (Multi HTC 96). Ve vhazovacím módu byl měřen tepelný obsah ($H_T - H_{298}$) InN při teplotě T. Metodou nejmenších čtverců byly vyhodnoceny parametry teplotní závislosti ($H_T - H_{298}$) ve tvaru $(H_T - H_{298}) = C_0 + C_1 T + C_2 T^2 + C_3 T^{-1}$. Při optimalizaci vysokoteplotních dat byla použita vazná podmínka ve tvaru $C_{pm}(298 \text{ K}) = 38,3 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$, přičemž tato hodnota byla převzata z literatury. Teplotní závislost C_{pm} se získá derivací této funkce. Na základě hodnot slučovacího tepla a molární entropie InN při teplotě 298 K uvedených v literatuře a získané závislosti $C_{pm}(T)$ byly vypočteny základní termodynamické funkce pevného InN v oboru teplot 298 – 900 K. Součástí této práce je i porovnání našich experimentálních výsledků s hodnotami uvedenými v literatuře.

Charakterizace oxidů vznikajících při tepelném rozkladu Cu-Mg-Mn hydrotalcitu

Autor: Tomáš Rojka
Ročník: 5.
Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. František Kovanda, CSc.

Sloučeniny typu hydrotalcitu obecného složení $M^{II}_{1-x}M^{III}_x(OH)_2A^{n-}_{x/n} \cdot yH_2O$, kde M^{II} a M^{III} jsou dvojmocné a trojmocné kovové kationty a A^{n-} n-mocné anionty, se často používají jako prekurzory pro přípravu katalyzátorů na bázi směsných oxidů kovů M^{II} a M^{III} . Prekurzory typu Cu-Mg-Mn hydrotalcitu s molárním poměrem Cu:Mg:Mn = 1:1:1 byly připraveny srážecí reakcí roztoku dusičnanů uvedených kovů v zásaditém prostředí roztoku Na_2CO_3 a NaOH. Srážecí reakce byla vedena jak vsádkovým způsobem v reaktoru o objemu 1000 ml, tak v míchaném průtočném reaktoru o pracovním objemu 100 ml. Získané prekurzory byly zahřívány na vzduchu při zvolené teplotě (100 – 1100 °C) po dobu 2 hodin a pak ochlazeny na laboratorní teplotu. U kalcinačních produktů byl změřen jejich specifický povrch a práškovou rentgenovou difrakční analýzou určeno jejich fázové složení. Voltametrická měření v kombinaci s jodometrickou titrací a chemickou analýzou byla použita k určení mocností Cu a Mn a k odhadu podílu amorfni fáze ve vzorcích. Bylo zjištěno, že k tepelnému rozkladu Cu-Mg-Mn prekurzoru dochází při teplotách do 200 °C, kdy na difraktogramu vymizely píky hydrotalcitu a vzorek byl amorfni. Zvyšující se kalcinační teplota vedla k postupné krystalizaci oxidů, především CuO (tenoritu) a spinelu $CuMn_2O_4$.

Studium tenkých kovových vrstev na polymerním filmu

Autor: Petr Slepíčka
Ročník: 5.
Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Doc.RNDr. Vladimír Rybka DrSc.

Tenké kovové vrstvy nacházejí široké uplatnění zejména v elektronice (aktivní i pasivní prvky), ale i v jiných oblastech (např. v potravinářství při balení potravin). Vývoj elektroniky směřuje ke stále se zmenšujícím rozměrům součástek, s tím souvisí také zmenšování tloušťky vrstev, což je doprovázeno i výraznou změnou jejich charakteru. Tenké kovové vrstvy (Au, Ag) byly připraveny metodou katodového naprašování na PET (polyethylentereftalát, tloušťka 50 μm). Byla studována jejich homogenita, spojitost a tloušťka v závislosti na době naprašování při konstantní velikosti proudového výboje zdroje. Tloušťky kovů větší než 20 nm byly měřeny na profilometru Talystep. Práce se zabývá zejména studiem ultratenkých vrstev naprášeného kovu (< 20 nm). Spojitost (souvislost) těchto vrstev byla studována měřením jejich elektrického odporu a měřením odrazu stojatého vlnění. Tloušťky vrstvy menší než 20 nm byly určeny pomocí vyhodnocení jejich UV-VIS spekter. Jako kontrolní metoda byla použita atomová absorpční spektroskopie (AAS). Za těchto experimentálních podmínek bylo zjištěno, že vrstva Au je souvislá při tloušťce 10 nm a vyšší. Souvislá, avšak nehomogenní je od 4 do 10 nm, při tloušťce menší než 4 nm je nesouvislá. Stříbro vykazuje podobné charakteristiky, avšak oproti Au jsou jeho souvislé vrstvy nehomogenní. Tvoří ostrůvky, které jsou patrné i u souvislých vrstev.

Adheze fibroblastů na modifikovaném polyethylentereftalátu (PET)

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

Polymerní materiály jsou v současné době využívány v experimentální medicíně a klinické praxi. Vedle dalších aplikací se využívají jako nosiče při kultivacích kožního krytu. Biokompatibilitu polymeru lze významně ovlivnit např. metodou iontové implantace.

V práci je sledována adheze tkáňových buněk (fibroblastů linie 3T3) na modifikovaném polyethylentereftalátu (PET) metodou *in vitro*. Vzorky byly modifikovány vysoce energetickými ionty O^+ , N^+ a C^+ (energie 190 keV, dávky 1×10^{13} - 3×10^{15} cm⁻²). Při sledování změn fyzikálně–chemických vlastností polymeru byla použita UV–VIS spektroskopie k určení konjugovaných dvojných vazeb vzniklých v polymerním řetězci. Goniometrickým měřením byl zjištěn kontaktní úhel destilované vody na povrchu polymeru, který souvisí s polaritou, která ovlivňuje biokompabilitu vzorku. Myší fibroblasty linie 3T3 byly nanášeny na sterilizovaný PET a počet naadherovaných buněk na povrchu vzorků byl pro srovnání určen v Bürkerově haemocytometru a analýzou obrazu pomocí programu Lucia.

Modifikace PET zvyšuje množství i homogenitu adherujících tkáňových buněk. Zvýšená biokompatibilita povrchu PET je dáвана do souvislosti se změnou chemické struktury polymeru, kdy dochází k jeho oxidaci, karbonizaci a tvorbě konjugovaných dvojných vazeb.

Sorpce As^V na hydratovaném Al_2O_3

Autor: Martina Urbanová
Ročník: 5.
Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Barbora Doušová, CSc.

Arsen patří k toxickým prvkům ohrožujícím životní prostředí. Ve vodných systémech se vyskytuje v anorganické formě obvykle jako As^V , při poklesu oxidačně-redukčního potenciálu dochází k jeho redukci na toxičtější As^{III} . V předkládané práci je studována sorpce arsenu anorganickým sorbentem na bázi hydratovaného Al_2O_3 , který patří k ekonomicky dostupným materiálům. Hydratovaný Al_2O_3 – böhmit ($AlOOH$) při vysokých teplotách (> 950 °C) přechází na γ - Al_2O_3 , u kterého byly již dříve zjištěny dobré sorpční vlastnosti a vysoká selektivita pro arsen. Byla sledována sorpce arsenu z vodného roztoku obsahujícího ionty $H_2AsO_4^-$ o počáteční koncentraci $2 \cdot 10^{-3}$ mol l⁻¹ sorbentem připraveným kalcinací böhmitu při 220 °C, 500 °C a 950 °C. Byla měřena rychlost sorpce jako závislost množství nasorbovaného As^V na čase. Naměřeny byly rovněž rovnovážné sorpční izotermny při laboratorní teplotě, z nichž byly pomocí Langmuirovy adsorpční izotermny vyhodnoceny sorpční kapacity böhmitu kalcinovaného při různých teplotách.

Optimalizace ohmických kontaktů pro Schottkyho diody

Autor: Martin Žilka

Ročník: 5.

Ústav inženýrství pevných látek

Školitel: Doc. Ing. Petr Macháček, CSc.

Schottkyho diody jsou významné prvky GaAs integrovaných obvodů. Pro svou funkci potřebují dobrý ohmický kontakt, protože velikost kontaktního odporu ovlivňuje mezní frekvenci těchto součástek. V rámci práce byl zkoumán metalický systém Au/Ti/Ge/Pd určený pro tyto kontakty. Bylo testováno 11 struktur na GaAs deskách typu n a posléze i na epitaxních vrstvách n-GaAs. Kontaktní metalizace byly deponovány v aparatuře UNIVEX 450 metodou vysokovakuového napařování. Slévání kontaktních struktur bylo prováděno rychlým teplotním žíháním (metoda RTA). Měrné kontaktní odpory byly měřeny u struktur na GaAs substrátech čtyřbodovou metodou a u struktur na epitaxních vrstvách metodou TLM. Nejlepších výsledků bylo dosaženo na strukturách Au(40 nm)/Ti(50 nm)/Ge(40 nm)/Pd(20 nm) žíhané při teplotě 544°C a Au(40 nm)/Ti(50 nm)/Ge(40 nm)/Pd(20 nm)/Ti(0,5 nm) žíhané při teplotě 616°C. Kontaktní odpory na těchto strukturách dosahovaly hodnot $4,86 \cdot 10^{-6} \Omega \text{cm}^2$ a $5,15 \cdot 10^{-6} \Omega \text{cm}^2$.