

Témata možných bakalářských prací na Katedře fyzikální chemie

Vědecko-výzkumná činnost se na Katedře fyzikální chemie realizuje ve čtyřech skupinách, a to (a) Povrchová chemie a katalýza, (b) Kinetické jevy ve sklotvorných systémech, (c) Přeměna olejů na cenné produkty a (d) Aplikovaná chemická kinetika a farmakokinetika.

Skupina Povrchová chemie a katalýza

Adsorpce a separace alkan/alken C2 a C3 uhlovodíků

- prof. Ing. Roman Bulánek, Ph.D.
- V rámci tohoto bloku témat by byla studována interakce nasycených a nenasycených uhlovodíků s nově syntetizovanými úzkoporézními zeolity. Bakalářské práce na toto téma by byly zaměřeny na experimentální studium a) IČ spekter adsorbovaných molekul uhlovodíků (rozlišení jednotlivých komplexů rozdíly ve frekvenci vibrace specifických vazeb), b) adsorpčních tepel kalorimetrickými technikami, c) adsorpčních rovnováh měřením volumetrických či gravimetrických izoterem za různých podmínek (určení adsorpčních a pracovních kapacit), a d) studium reálných separací měřením průrazových křivek (určení reálných separačních účinků adsorbentu).

Adsorpční teplo a jeho stanovení

- prof. Ing. Roman Bulánek, Ph.D.
- V rámci tohoto tématu bude řešena problematika stanovení tepelného zabarvení adsorpčních dějů. Znalost adsorpčního tepla je velmi důležitým chemicko-inženýrským a technologickým parametrem každého adsorpčního procesu. Navíc nám hodnota adsorpčního tepla a její závislost na adsorbovaném množství přináší řady nepřímých informací o charakteru interakce adsorbované částice s povrchem adsorbentu i o charakteru tohoto povrchu. Bakalářská práce se bude zabývat experimentálními aspekty stanovení adsorpčního tepla pomocí různých experimentálních přístupů.

Struktura a vlastnosti aktivních míst v katalyzátorech obsahujících bór

- prof. Ing. Roman Bulánek, Ph.D.
- V rámci tohoto bloku témat by byla studována katalytická účinnost katalyzátorů obsahujících bór v oxidativní dehydrogenaci lehkých nasycených uhlovodíků (C2-C4) na příslušné alkeny v katalytickém systému pevná látka – plyn. Bakalářské práce by se věnovaly a) syntéze pokročilých nanesených katalyzátorů (jako nosiče by byly použity různě strukturované SiO₂, Al₂O₃, TiO₂, ZrO₂ nebo MgO), b) fyzikálně chemické charakterizaci připravených i použitých katalyzátorů pomocí různých spektroskopických technik (IČ, Raman, XPS) a c) katalytickým testům v laboratorních mikroreaktorech.

In-situ charakterizační techniky jako nástroj výzkumu aktivních center pevných katalyzátorů

- prof. Ing. Libor Čapek, Ph.D.
- In-situ techniky jsou jedinečné díky možnosti využití měření materiálů přímo za reakčních podmínek či za specifických podmínek úpravy materiálů. To lze využít k odhalení aktivních center heterogenních katalyzátorů, které jsou zodpovědné za aktivitu daného materiálu. Bakalářská práce je zaměřena na popis in-situ DRS a in-situ DRIFT charakterizačních technik. Zhodnocení jejich přínosu při výzkumu aktivních center pevných katalyzátorů v heterogenních katalytických reakcích. Experimentální část je zaměřena na využití těchto technik při charakterizaci transformace hydrotalcitů na směsné oxidy a rekonstruované hydrotalcity, které se využívají při přípravě alternativních paliv.

Studium a syntéza acidobazických vlastností pevných katalyzátorů na bázi hydrotalcitů a směsných oxidů, využitelných k výrobě biopaliv

- prof. Ing. Libor Čapek, Ph.D.
- Materiály na bázi hydrotalcitů jsou hojně využívány v oblasti medicíny, povrchových úprav, elektrochemie a heterogenní katalýzy se zaměřením na výrobu alternativních zdrojů energie. Bakalářská práce je zaměřena na popis znalostí o acidobazických vlastnostech hydrotalcitů a směsných oxidů. Experimentální část je zaměřena na přípravu těchto pevných katalyzátorů a studium jejich acidobazických vlastností s ohledem na jejich využití v heterogenní katalýze.

Využití paměťového efektu při studiu heterogenních katalyzátorů na bázi hydrotalcitů

- prof. Ing. Libor Čapek, Ph.D.
- Materiály na bázi hydrotalcitů jsou hojně využívány v oblasti medicíny, povrchových úprav, elektrochemie a heterogenní katalýzy se zaměřením na výrobu alternativních paliv. Bakalářská práce je zaměřena na zhodnocení potenciálu tzv. paměťového efektu při využití rekonstruovaných hydrotalcitů jako pevných katalyzátorů. Experimentální část je zaměřena na přípravu rekonstruovaných hydrotalcitů a studium jejich acidobazických a texturních vlastností.

Potenciál průtokového (mikro) foto-reaktoru, využívající fotokatalyzátory ve formě tenkých vrstev nanesených na skelných materiálech

- prof. Ing. Libor Čapek, Ph.D., Ing. Lada Dubnová
Fotokatalýza je dnes velmi populární oblast výzkumu. Bakalářská práce může být v této oblasti směřována do dvou různých oblastí. 1. Důraz bude kladen na popis mikro fotoreaktorů používaných v rámci různých fotokatalytických procesů. Experimentální část práce může být zaměřena na přípravu fotokatalyzátoru naneseného ve formě tenké vrstvy a studium fotokatalytického chování tohoto materiálu v průtokovém mikro foto reaktoru. 2. Důraz bude kladen na možnosti syntézy fotokatalytických materiálů a jejich nanášení v podobě tenkých filmů na skelné materiály využitelné a navržené speciálně pro průtokový mikrofotoreaktor. Jde o velmi atraktivní typ ukotvení fotokatalyzátoru umožňující jeho další praktické využití. V rámci bakalářské práce je rovněž možná spolupráce s Institutem environmentálních technologií.

Potenciál fotokatalytických procesů pro degradaci organických látek v odpadních vodách

- prof. Ing. Libor Čapek, Ph.D., Ing. Lada Dubnová
- V současné době je značná pozornost zaměřena na odstranění léčiv z odpadních vod. Právě fotokatalýza může představovat velmi užitečný způsob, jak tohoto dosáhnout. Teoretická část bakalářské práce je zaměřena na zhodnocení potenciálu fotokatalytické degradace organických látek (léčiv) z odpadních vod. Zejména pak jde o popis současného stavu výzkumu v této oblasti. V rámci experimentální části může být pozornost zaměřena na fotokatalytickou degradaci modelové organické látky.

Fotokatalyzátory na bázi oxidu titaničitého a zvýšení efektivity fotokatalytického procesu

- prof. Ing. Libor Čapek, Ph.D., Ing. Helena Drobná, Ph.D., Ing. Lada Dubnová
- TiO_2 je jedním z nejpoužívanějších fotokatalyzátorů, ovšem jeho aplikace jsou omezeny některými vlastnostmi daného materiálu, které lze vylepšit jeho modifikací, čímž lze rozšířit možnost využití fotokatalyzátoru a zlepšit fotokatalytickou aktivitu. Bakalářská práce může být v této oblasti směřována do dvou různých oblastí, vždy s využitím široké škály charakterizačních technik a s důrazem na aplikační využití uvedené skupiny materiálů.
 1. Syntéza kovem/nekovem dopovaných TiO_2 fotokatalyzátorů a studium jejich optických, elektronových a strukturních vlastností.
 2. Syntéza fotokatalyzátorů s heteropřechodem a studium jejich optických, elektronových a strukturních vlastností.

Fotokatalytické štěpení vody

- prof. Ing. Libor Čapek, Ph.D., Ing. Helena Drobná, Ph.D., Ing. Lada Dubnová
- Fotokatalytické štěpení vody představuje velmi atraktivní způsob získání vodíku. Bakalářská práce je zaměřena na popis a zhodnocení potenciálu fotokatalytického štěpení vody. Experimentální část je zaměřena na přípravu práškových fotokatalyzátorů a studium jejich aktivity ve vsádkovém fotoreaktoru. V rámci bakalářské práce je rovněž možná spolupráce s Institutem environmentálních technologií.

Způsoby výroby vodíku s využitím zelené chemie (teoretická práce)

- prof. Ing. Libor Čapek, Ph.D.
- Bakalářská práce týkající se novodobých technologických procesů sloužící k výrobě energie ve formě čistého vodíku, využitelného například pro palivové články, které jsou jedním ze směrů alternativních paliv z oblasti zelené chemie.

Studium ko-adsorpce chromatografickými metodami.

- doc. Ing. Pavel Čičmanec, Ph.D.
- Předpokládaná práce se bude zabývat teoretickou rešerší metod studia ko-adsorpce plyných látek na pevných materiálech a jejich experimentálním měřením s využitím chromatografických technik (metody ZLC a průrazových křivek) s cílem získat reálnější popis interakce adsorbovaných látek s povrchem i mezi sebou za úroveň jednoduché teorie ideální adsorpce (IAST).

Studium adsorpční kinetiky a rovnovážného chování gravimetrickou metodou.

- doc. Ing. Pavel Čičmanec, Ph.D.
- Předpokládaná práce se bude zabývat studiem adsorpce a difuze plyných látek v zeolitických materiálech s využitím vybudované gravimetrické metody. Součástí práce bude i literární rešerše na téma dosud publikovaných výsledků a metod vyhodnocení experimentálních údajů.

Využití studia kinetiky probe reakcí ke studiu acidobazických vlastností zeolitů.

- doc. Ing. Pavel Čičmanec, Ph.D.
- Předpokládaná práce se bude zabývat teoretickou rešerší a experimentálním měřením kinetických parametrů testovací reakce (probe reakce) k charakterizaci acidobazických vlastností zeolitických materiálů. Je předpokládáno využití metody teplotně programované povrchové reakce (TPSR) v kombinaci s klasickými katalytickými testy.

Skupina Kinetické jevy ve sklotvorných systémech

Studium povrchové mobility v tenkých vrstvách chalkogenidových materiálů

- Ing. Jaroslav Barták, Ph.D.
- Využití nanoindentace a mikroskopie atomárních sil pro stanovení viskózního chování a samodifúze v tenkých vrstvách a površích chalkogenidových sklotvorných materiálů. Studium je zaměřeno na získání a popis teplotní závislosti viskozity v blízkosti teploty skelného přechodu. Práce je více zaměřena na analýzu experimentálních dat a výpočty viskozity a difúzního koeficientu.

Přímé sledování růstu krystalů v amorfních materiálech pomocí mikroskopických metod

- Ing. Jaroslav Barták, Ph.D.
- Studium rychlosti růstu krystalů v amorfních materiálech (chalkogenidová skla, amorfni organická skla) pomocí optické mikroskopie. Využití teplotní závislosti rychlosti růstu ke stanovení kinetických parametrů růstových modelů a k predikci rychlosti růstu v širokém teplotním intervalu. Práce je experimentálně zaměřena.

Studium povrchového napětí v chalkogenidových sklotvorných materiálech

- Ing. Jaroslav Barták, Ph.D.
- Studium povrchového napětí v oblastech taveniny, podchlazené taveniny a skla v chalkogenidových sklotvorných materiálech. Ke studiu je využito popisu tvaru visící kapky a kapky ležící na podložce a dále analýzy úhlu smáčení různých kapalin na povrchu studovaného materiálu. Práce je experimentálně zaměřena.

Stanovení fázových diagramů směsí

- Ing. Jana Shánělová, Ph.D.
- Využití diferenciální skenovací kalorimetrie ke stanovení fázových diagramů převážně chalkogenidových směsí. Stanovení oblastí sklotvornosti, krystalizačních teplot, teplot tání a eutektik. Identifikace krystalických fází pomocí práškové rentgenové difrakce.

Studium kinetiky krystalizačních procesů

- Ing. Jana Shánělová, Ph.D.
- Studium krystalizačních procesů v amorfních materiálech jako jsou chalkogenidová skla, amorfní oxidy nebo léčiva s využitím diferenciální skenovací kalorimetrie v kombinaci s mikroskopickými technikami. Popis nukleačního chování a následného růstu krystalů. Nalezení pravděpodobného kinetického modelu krystalizačního procesu.

Modelování krystalizačních procesů

- Ing. Jana Shánělová, Ph.D.
- Modelování krystalizačních procesů v amorfních materiálech na základě fyzikálně podloženého mechanismu nukleace, růstu krystalů, velikosti zrn práškových materiálů a teplotního programu. Porovnání simulovaného průběhu se skutečnými průběhy stanovenými na základě diferenciální skenovací kalorimetrie a mikroskopie.

Skupina Přeměna olejů na cenné produkty

Biomaziva jako náhrada za ropná maziva

- doc. Ing. Martin Hájek, Ph.D.
- Maziva mají důležitou úlohu při různých procesech (snížení opotřebení, odvod tepla, ...) a vyrábějí zejména z ropy. Práce se zabývá možnostmi náhrady maziv pomocí rostlinných olejů (obnovitelné zdroje), které lze epoxidací přeměnit na látky s obdobnými vlastnostmi jako maziva z ropy. Jedná se o experimentální práci: epoxidace olejů (případně esterů z nich připravených) tak aby splňovaly požadavky pro maziva. Práce probíhá ve spolupráci s Paramo a.s.

Bioetanol, jeho výroba a využití

- doc. Ing. Martin Hájek, Ph.D.
- Práce se bude zabývat popisem možností využití (bio)ethanolu. Bioethanol, jako surovinu vyráběnou z obnovitelných zdrojů pomocí fermentace, lze využít pro výrobu mnoha dalších látek, které jsou v současnosti vyráběny z ropy (butanol, hexanol, aceton...). Práce může být experimentální (spolupráce s ORLEN, UniCre) a zabývala by se katalytickou přeměnou etanolu na další produkty.

Využití epoxidovaných olejů pro přípravu biopolymerů

- doc. Ing. Martin Hájek, Ph.D.
- Biopolymerů se připravují polymerací monomerů vyrobených z obnovitelných surovin, zejména z rostlinných olejů. Monomery lze připravit z různých typů olejů, esterů nebo mastných kyselin epoxidací peroxidem vodíku. Jedná se o experimentální práci porovnání různých způsobů přípravy monomerů a jejich následnou polymeraci.

Heterogenní katalyzátory a jejich syntéza

- doc. Ing. Martin Hájek, Ph.D.
- Heterogenní katalyzátory jsou široce používané v chemii pro výroby různých látek. Práce se zabývá využitím a porovnáním různých typů katalyzátorů zejména pro přípravu biopaliv (bioethanol, biobutanol, bionafta, biomethanol ...). Experimentální část je možná (spolupráce s ORLEN, UniCre): syntéza katalyzátorů a jeho testování ve vybraných reakcích.

Potenciál alternativních pohonů zejména v dopravě

- doc. Ing. Martin Hájek, Ph.D.
- V dopravě se začínají více uplatňovat různé alternativní pohony místo ropy (biopaliva, elektřina, vodík). Práce bude zaměřen na popis a porovnání jednotlivých druhů pohonů včetně jejich výhod a nevýhod.

Skupina Aplikovaná chemická kinetika a farmakokinetika.

Tablety potahované 3D tiskem a „alcohol-induced dose dumping effect“

- doc. Ing. Alena Komersová, Ph.D.
- „Alcohol-induced dose dumping effect“ představuje vážný problém zejména u pevných lékových forem s prodlouženým uvolňování účinné látky. Tato experimentální BP je zaměřena prostudování možnosti eliminace vlivu alkoholu na uvolňování léčiva pomocí potažení tablet vhodným polymerem s využitím 3D tisku.

Studium procesu bobtnání polymerních filmů z nerozpustných derivátů hyaluronanu

- doc. Ing. Alena Komersová, Ph.D.
- Polymerní filmy založené na polysacharidu hyaluronanu (HA) jsou zajímavými materiály s potenciálem pro využití v medicíně. Pro přípravu filmů jsou využívány zejména ve vodě nerozpustné deriváty HA, kdy je možné volbou stupně modifikace vhodně nastavit biodegradabilitu filmu. Tato experimentální bakalářská práce je realizována ve spolupráci s firmou Contipro, s.r.o. a jejím cílem je studium kinetiky procesu bobtnání filmů z lauroyl derivátů HA.

Kombinace alginátu a hypromelózy v lékových formách

- doc. Ing. Alena Komersová, Ph.D.
- Hydroxypropylmethylcelulóza (HPMC) v kombinaci s různými přírodními polymery, např. polysacharidy, se ve farmaceutické technologii využívá při přípravě různých lékových forem. Tato teoretická bakalářská práce je zaměřena na možnosti použití HPMC v kombinaci s algináty v různých lékových formách, zejména pak při přípravě matricových tablet na bázi polyelektrolytového komplexu, které umožňují řízené uvolňování léčiva.

Vliv alkoholu na disoluční chování matricových tablet na bázi karagenanu

- doc. Ing. Alena Komersová, Ph.D.
- „Alcohol-induced dose dumping effect“ představuje vážný problém zejména u pevných lékových forem s prodlouženým uvolňování účinné látky. Tato experimentální BP je zaměřena studium disolučního chování matricových tablet na bázi polyelektrolytového komplexu chitosan-karagenan za přítomnosti alkoholu v disolučním médiu.