

# **Studentská vědecká konference 2006**

## **Sekce: ANORGANICKÁ CHEMIE**

Ústav anorganické chemie 24.11.2006, zahájení v 9:00 hodin, budova B,  
posluchárna B06

**Komise:**

**Doc. Dr. Ing. David Sedmidubský - předseda**  
**prom. chem. Ivan Jirka, CSc. (ÚFCH-JH AV ČR)**

**Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.**

**Ing. Linda Salavcová**

**Doc. RNDr. Josef Stejskal, CSc.**

**Ing. Irena Hoskovcová, CSc. – organizační tajemník**

**Přihlášeno: 8 účastníků**

**Eva Májová**

**Hana Malichová**

**Jakub Stárek**

**Radim Dostál**

**Radka Zvěřinová**

**Stanislav Rubáš**

**Štěpán Huber**

**Tomáš Gruber**

Sekce : Anorganická chemie

## Užití metod sol-gel při přípravě bizmutových supravodičů

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

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

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

Sekce : Anorganická chemie

## Aktivní optické vlnovody obsahující $\text{Er}^{3+}$ a $\text{Cu}^+$

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

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

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

Sekce : Anorganická chemie

## Kobaltity s nesouměřitelnou strukturou – materiály pro termoelektrické aplikace

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

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

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

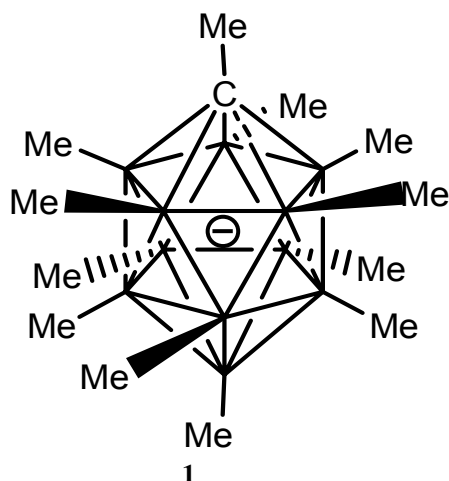
Autor: Radim Dostál

Ročník: 5.

Ústav: Polymerů a makromolekulární chemie / ÚACH AVČR Řež u Prahy/  
Colorado University at Boulder, USA

Školitel: Ing. Zbyněk Janoušek, CSc.

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



V předkládané práci je popsána několikastupňová syntéza aniontu (**1**),<sup>2-5</sup> vycházející z borohydridu sodného,  $\text{NaBH}_4$  a z etherátu fluoridu boritého,  $\text{BF}_3\cdot\text{Et}_2\text{O}$ . Všechny meziproducty i produkty získané při této syntéze byly charakterizovány pomocí  $^1\text{H}$ ,  $^{11}\text{B}$  a  $[^{11}\text{B}-^1\text{H}(\text{decoupled})]$  NMR spektroskopie. Lithná sůl aniontu (**1**) byla použita jako katalyzátor v některých radikálových polymerizacích a kopolymerizacích.

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

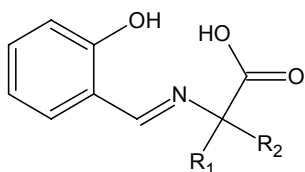
### Literatura:

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

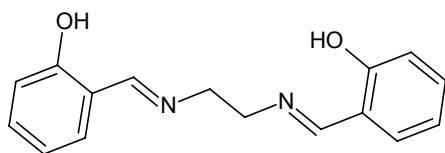
Sekce : Anorganická chemie

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

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



Obr. 1 H<sub>2</sub>L



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

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

Sekce : Anorganická chemie

## Dotace erbia do porézních skel pro fotonické aplikace

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

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

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

Sekce : Anorganická chemie

## Likvidace odpadních vod po výrobě třaskavin

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

Odpadní vody z výroby výbušnin jsou velmi nebezpečným odpadem nejen pro možnost exploze, ale i pro toxické látky, které často jejich likvidací vznikají. Je mnoho teoretických a praktických způsobů, jak tyto látky likvidovat, většina s sebou však přináší další problémy spojené s účinností či ekologií likvidace, případně korozivní vlivy na používané vybavení. V práci byla testována možnost likvidace tohoto typu odpadu s využitím fotokatalytické oxidace na tenké vrstvě fotoaktivního  $\text{TiO}_2$  Degussa P-25. Vzorke odpadních vod z výroby azidu olovnatého, pikraminátu olovnatého a trinitroresorcinátu olovnatého, stejně jako vody modelové byly exponovány UV záření výbojky s dominantní vlnovou délkou 254nm. Postupné odbourání třaskavin v odpadních vodách bylo vyhodnocováno na základě barevných změn roztoků nebo intenzity změny zbarvení po přidání indikační látky spektrofotometrem ColorQuest XE. Bylo rovněž posuzováno, do jaké míry lze tento proces ještě urychlit přidáním dalšího oxidačního reagentu.



Sekce : Anorganická chemie

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

Autor: Tomáš Gruber  
Ročník: 4.  
Ústav: Ústav anorganické chemie  
Školitel: Doc. Ing. Dagmar Sýkorová, CSc.  
Ing. Vít Jakeš

Vlastnosti supravodičů závisí jak na složení, tak na struktuře. V této práci je studován vliv změny složení na vlastnosti supravodiče. Předpokladem pro tuto práci byla hypotéza, že náhrada některých atomů ve struktuře za atomy větší ze stejné podskupiny povede ke zvětšení prnutí v mřížce, čímž by měly být ovlivněny transportní vlastnosti supravodiče.

Cílem práce bylo zjistit, jak se změní magnetické a elektrické vlastnosti (kritická teplota, kritická proudová hustota) a poměr množství jednotlivých fází v supravodivém systému Bi – Sr – Ca – Cu – O , pokud v něm provedeme částečnou substituci vápníku, resp. stroncia baryem. Vzorky supravodičů o stechiometrickém složení  $\text{Bi}_{1,6}\text{Pb}_{0,4}\text{Sr}_2\text{Ca}_{2,5-y}\text{Ba}_y\text{Cu}_{3,5}\text{O}_\delta$  a  $\text{Bi}_{1,6}\text{Pb}_{0,4}\text{Sr}_{2-x}\text{Ca}_{2,5}\text{Ba}_x\text{Cu}_{3,5}\text{O}_\delta$ , kde  $y = 0; 0,4; 0,8; 1,2; 1,6$  a  $x = 0; 0,4; 0,8; 1,2$  byly připraveny standardní reakcí v pevné fázi (technologický postup – mletí 10 minut, 1. kalcinace při teplotě 800°C po dobu 24 hodin, mletí 10 minut, 2. kalcinace při teplotě 800°C po dobu 24 hodin, mletí 10 minut, lisování tablet 30 sekund při tlaku 800 MPa a slinování tablet při teplotě 840°C po dobu 168 hodin). U takto připravených vzorků byla naměřena teplotní závislost elektrického odporu a kritické proudové hustoty. Fázové složení vzorků bylo určeno RTG fázovou analýzou.