

Studentská vědecká konference 2006

Sekce: ANORGANICKÉ NEKOVOVÉ MATERIÁLY I

Ústav organické chemie, 24.11.2006

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

Komise:

Prof. Ing. Josef Matoušek, DrSc. - předseda

Doc. RNDr. Ondrej Gedeon, PhD.

Ing. Antonín Lisý, CSc.

Doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

Ing. Eva Gregorová, CSc. - organizační tajemník

Přihlášeno: 9 účastníků

Dlabal Petr

Fiala Jakub

Honsová Martina

Charvátová Soňa

Lošot Rostislav

Mesteková Petra

Michal Jakub

Palich Martin

Petrželová Anna

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Systém analýzy cementářského slínku

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

Analýza slínku je nedílnou součástí kontroly při výrobě portlandského cementu. V současné době je slínek charakterizován chemickým složením (především CaO , Al_2O_3 , SiO_2 , Fe_2O_3 a dalších) a mineralogickým složením (mikroskopicky na nábrusech). Tento systém analýzy slínku však v současné době postrádá některé důležité informace. V práci je navržen rozšířený systém hodnocení cementářského slínku a to: mikroskopickou analýzou (nábrus) rtg. fluorescenční analýzou (celkové chemické složení), rtg. difrakční analýzou (kvalitativní a kvantitativní mineralogické složení). Mikroskopická analýza nábrusů je prováděna na optickém mikroskopu s digitálním analyzátozem obrazu systému Lucia G, kdy lze zjistit habitus případně i obsah jednotlivých fází. Klíčovou otázkou pro provádění mikroskopické analýzy digitálním analyzátozem je způsob přípravy nábrusů. Rtg. difrakční prášková analýza využívá vyhodnocovacího programu High Score X'pert Plus ve spojení s databází minerálů PDF2, jenž umožňuje kvalitativní stanovení jednotlivých modifikací slínkových minerálů. Dále je prováděna kvantitativní analýza slínkových minerálů (Rietveld). Projekt systému je podporován Svazem výrobců cementu ČR.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Kompozitní žárovzdorné materiály s přídavkem metakaolinu

Autor: Jakub Fiala
Ročník: 5
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kutzendörfer, CSc.

Metakaolin v současné době patří mezi nedostatečně využitě suroviny a je důležité hledat jeho další uplatnění. Tato práce předkládá jednu z možných cest využití této suroviny a to ve speciálních běžných žárobetonech (RCC), kde je snaha ho použít jako plastifikátor směsi. Tyto speciální RCC materiály se od běžných žárobetonů liší nízkým obsahem hlinitanového cementu. Cílem této práce bylo zlepšit zpracovatelnost těchto směsí při zachování stejného vodního součinitele a zjistit ovlivnění žárových vlastností. Byly sledovány dva hlavní směry jednak vliv přídavku metakaolinu (1 až 5 hm. %) a vliv částečné náhrady hlinitanového cementu metakaolinem (1 až 2 hm. %) s ohledem v obou případech na zpracovatelnost těchto směsí a dále na mechanické a termomechanické vlastnosti. Ukázalo se, že nízké přídavky (max. do 3 hm. %) zlepšují plastičnost těchto speciálních RCC žárobetonů. Vliv u těchto přídavků na mechanické a termomechanické vlastnosti nebyl prokázán. Vedle toho se podařila pouze náhrada 1 hm. % hlinitanového cementu metakaolinem, aniž by došlo ke zhoršení mechanických vlastností. Lze konstatovat, že pouze malé množství metakaolinu, ať už jako přídavek nebo náhrada cementu v žárobetonové směsi, je žádoucí pro zlepšení plastičnosti při zachování stejného vodního součinitele těchto sledovaných speciálních RCC žárobetonů.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vliv PVA na vlastnosti vodné suspenze ZrO₂

Autor: Martina Honsová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Jiří Havrda, CSc.

Práce se zabývá stabilizací organické pórotvorné přísady ve vodné suspenzi ZrO₂ určené k přípravě ZrO₂ keramiky s řízenou pórovitostí.

Z dosavadních poznatků plyne, že přidavkem PVA lze ovlivnit kinetickou a koloidní stabilitu suspenze s přidanou pórotvornou přísadou a dále, že přidavek PVA rovněž příznivě ovlivňuje mechanické vlastnosti (pevnosti) těles po vysušení. Připravené suspenze o složení 75 až 77 hm% pevné fáze a 0 až 0,8 hm% PVA a dále suspenze o konstantním obsahu pevné fáze 77 hm% s proměnným obsahem PVA v intervalu 0 až 0,4 hm% byly proměřeny na rotačním viskozimetru. Z měření reologických vlastností připravených suspenzí vyplývá, že pro zachování stability u suspenzí s proměnným obsahem pevné fáze a PVA je limitujícím složení 76 hm% ZrO₂ a 0,5 hm% PVA a u suspenzí s konstantním obsahem pevné fáze 77 hm% ZrO₂ je maximální možný přidavek 0,3 hm% PVA. Byl potvrzen pozitivní vliv přidavku PVA na mechanickou pevnost po vysušení u připravených těles. Dále bylo vyhodnoceno, že přidavek PVA nemá významný vliv na mikrostrukturu, resp. objemovou hmotnost připravených těles. Byla vyhodnocena optimální koncentrace PVA v suspenzi s obs. 77 hm% ZrO₂ vhodná pro stabilizaci přidávané pórotvorné přísady.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Kvantová simulace křemičitých struktur

Autor: Soňa Charvátová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: O. Gedeon, J. Macháček

Molekulové simulace patří k jednomu z hlavních nástrojů zkoumání struktury a vlastností materiálů. Tato práce se zabývá výpočtem meziatomového potenciálu na malém klastru molekuly $\text{Si}(\text{OH})_4$, který lze následně použít pro simulace velkých neuspořádaných systémů s několika tisíci atomy.

Pro nařizování parametrů meziatomových potenciálů se vybrala základní strukturní jednotka křemičitých systémů, $(\text{SiO}_4)^{4-}$, na kterou se navázaly čtyři vodíky. Optimalizace geometrie byla provedena pomocí ab-initio simulace, založená na teorii funkcionálu elektronové hustoty (DFT) s použitím simulačního programu VASP. Tento přístup je v současnosti jediný, který umožňuje simulace velkých amorfních systémů. Zkracováním a prodlužováním jedné vazby Si-O a provedením následné elektronové relaxace byla vytvořena potenciálová funkce, která charakterizuje závislost vazebné energie na meziatomové vzdálenosti. Proměněním energie vazebných úhlů se získaly další výsledky, jež umožňují srovnat výsledky VASPU se sofistikovanějšími kvantovými výpočty. V neuspořádaných systémech se vyskytují různě deformované klastry a tedy prezentované výsledky nabízejí základní náhled na energetickou bilanci těchto strukturních jednotek. Získané výsledky budou převedeny na vytvoření empirické potenciálové funkce v programu GULP.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vliv tvaru dávkovacího žlabu na chemickou homogenitu

Autor: Rostislav Lošot

Ročník: 4.

Ústav: Ústav skla a keramiky

Školitel: Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Chemická a teplotní homogenita skloviny na výstupu z dávkovacího žlabu (DŽ) jsou považovány za základní atributy, které by měla sklovina splňovat, protože mají přímý vliv na následující tvarovací proces. Prostřednictvím matematického modelování pomocí CFD-Computational Fluid Dynamics programu FLUENT, byla zjišťována chemická homogenita v lomených pravoúhlých dávkovacích žlabech, které se lišily geometrií ohybu. Skelnou nehomogenitou, tj. šířou na vstupu do dávkovacího žlabu byla sklovina obohacena o ZrO_2 a Al_2O_3 .

Hodnotícím kritériem homogenizačního účinku byla koncentrace směsi c_{mix} , která nabude hodnoty 1 právě tehdy, když dojde k úplné homogenizaci skloviny a šířky. Výstupy z matematického modelu ukázaly, jakým způsobem ovlivňuje geometrie ohybu homogenitu skloviny na výstupu z dávkovacího žlabu a jak zásadní význam má poměr hustot šířky a základní skloviny, neboť přímo na něm závisí difúzní procesy, které jsou řídicími ději chemické homogenizace.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vliv obsahu Er a Yb na fotoluminiscenci křemičitých skel o vlnové délce 1,5 μm

Jméno: Petra Mesteková

Ročník: 3.

Ústav: Ústav skla a keramiky

Školitel: Dr.Ing.Martin Míka

S ohledem k rostoucímu zájmu o efektnější a rychlejší přenos digitálních dat se hledá co nejúčinnější cesta k dosažení tohoto cíle. Ideálním řešením je užití zcela optického systému místo nedokonalé OEO (optic-electric-optic) struktury. Integrované komponenty z aktivně optických skel jsou na rozdíl od současných komponent vláknové techniky menší, jednodušší, a tím i levnější na výrobu. Pro přípravu aktivních optických vlnodů se v naší laboratoři vyvíjejí křemičitá skla na bázi Na_2O - ZnO - SiO_2 s přísadkou atomů Er a Yb ve formě oxidů. Pro toto základní složení hledáme optimální koncentraci Er a Yb s cílem dosáhnout maximální intenzity luminiscence v oblasti kolem 1,5 μm , při maximální šířce emisního pásu a při době života excitovaného stavu alespoň 5 ms. Plánovaným experimentem byla navržena a utavena skla s různým obsahem Er a Yb. Vzorky skel byly nařezány a opticky vyleštěny. U takto připravených skel byla změřena jejich absorpční a emisní spektra. K excitaci emisních spekter byl použit laser o vlnové délce 980 nm. V práci je diskutován vliv koncentrace Er a Yb na zmíněné optické vlastnosti.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Protonově vodivé membrány pro středně teplotní H₂/O₂ palivové články

Jméno: Jakub Michal
Ročník: 4.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Středně teplotní kyslíko-vodíkové palivové články představují alternativní zdroj elektrické energie, který by mohl v budoucnu umožnit náhradu spalovacích motorů motory elektrickými. Palivové články využívají přímé přeměny chemické energie na elektrickou. Výhody spočívají ve vyšší účinnosti a především v šetrnosti k životnímu prostředí, neboť odpadem je čistá voda. Klíčovou složkou článku je hybridní anorganicko-organická fosforečno-křemičitá membrána s vysokou protonovou vodivostí, která umožňuje pohyb protonů mezi anodou a katodou. Současné protonově vodivé membrány musí být udržovány v hydratovaném stavu atmosférou s vysokou relativní vlhkostí, aby byla zachována jejich vysoká protonová vodivost. Pro použití v automobilech se předpokládá pracovní teplota palivového článku v intervalu 120-130 °C. Při teplotách nad 100°C je však udržování membrán v hydratovaném stavu technicky velmi náročné a drahé. Proto pracujeme na syntéze membrán, která jsou protonově vodivé při teplotách od 100°C do 130°C za velmi nízké relativní vlhkosti. Složení membrán upravujeme vzhledem k dosažení optimálních elektrochemických, mechanických a chemických vlastností. Protonovou vodivost měříme impedanční spektroskopii a výsledné chování membrány testujeme přímo na kyslíko-vodíkovém palivovém článku.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Příprava leucitových dentálních kompozitů

Autor: Martin Pallich
Ročník: 5
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková

V současnosti je v dentální implantologii úspěšně používáno spojení nosných kovových čepů a vrchních kovokeramických korunek. Hlavní krystalickou fází keramické části kovokeramických náhrad je leucit (KAlSi_2O_6). Snadná spájitelnost keramického kompozitu s kovovou konstrukcí je způsobena vysokou hodnotou koeficientu teplotní roztažnosti tetragonálních leucitových zrn rozptýlených v amorfní matrici. Dosavadní přípravy leucitových dentálních kompozitů byly založeny na krystalizaci leucitu z taveniny v průběhu chlazení z teploty výpalu nebo na oddělené vysokoteplotní syntéze leucitu. Oba děje jsou časově dosti náročné, proto jsou zkoumány nové technologie přípravy dentálních surovin. V nedávné době byla vyvinuta metoda hydrotermální syntézy tetragonálního leucitu, která umožňuje přípravu monodisperzního leucitového prášku.

Cílem této práce je pomocí technologie hydrotermální syntézy leucitového prekurzoru připravit dentální surovinu s přesně definovaným podílem krystalické fáze a amorfní matrice. Následným tepelným zpracováním takto připravené suroviny obsahující 20% tetragonálního leucitu byl získán leucitový kompozit jehož hodnota koeficientu teplotní roztažnosti je blízká hodnotám kovové konstrukce.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vliv oxidů vzácných zemin na vlastnosti skel

Autor: Anna Petrželová
Ročník: 5
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Skupina prvků velmi podobných chemických a fyzikálních vlastností, které v periodické tabulce následují za lanthanem, se nazývají lanthanoidy. Sem se řadí tyto prvky: cer, praseodym, neodym, promethium, samarium, europium, gadolinium, terbium, dysprosium, holmium, erbium, thulium, yterbium a lutecium.

Použití oxidů vzácných zemin ve sklářském průmyslu se v současné době značně rozrůstá, protože se rok od roku zvyšuje produkce lanthanoidů, a tím klesá i jejich cena. Bylo zjištěno, že už i malé přídavky těchto oxidů výrazně ovlivňují vlastnosti skloviny. Pro jejich použití v masových výrobcích je nutno znát, jak obsah těchto oxidů ovlivňuje důležité parametry využitelné v technologické praxi – měrný elektrický odpor, viskozitu, RMS, povrchové napětí, krystalizační a dilatometrické veličiny, hydrolytickou odolnost, spektrální propustnost a L^* - a^* - b^* souřadnice.

Výše uvedené údaje se v literatuře objevují pouze sporadicky, proto tento úkol pro oxidy neodymu, praseodymu, thulia a lutecia s aplikací na 24%ní olovnatý křišťál bude předmětem diplomové práce. Zde předkládaná práce pak zpracovává první část tohoto úkolu – vliv obsahu oxidu neodymu na některé z výše uvedených parametrů.