

Název programu: Chemie, technologie a vlastnosti materiálů

Forma: prezenční

Název: Alternativní anorganická pojiva na bázi zrychleného karbonatačního vytvrzování

Školitel: Ing. Eva Bartoníčková, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Jiří Másilko, Ph.D.

Anotace: Disertační práce je zaměřena na studium zrychleného karbonatačního vytvrzování syntetických fází v systému CaO–SiO₂, konkrétně wollastonitu, larnitu, calcio-olivínu, rankinitu a hatruritu. Výzkum se soustředí na analýzu vlivu vnějších procesních podmínek na kinetiku a mechanismus karbonatačního procesu laboratorně připravených čistých fází, přičemž hodnoceny jsou jak výsledné mechanické vlastnosti materiálů, tak detailní charakterizace vznikajících karbonatačních produktů. Získané poznatky jsou následně aplikovány na vybrané sekundární suroviny pocházející z průmyslové výroby a různých recyklačních procesů. Zvláštní pozornost je věnována vlivu cizích iontů přítomných v sekundárních surovinách na průběh karbonatace a na tvorbu a stabilitu karbonatačních produktů.

Název: Funkčně modifikované C–S–H gely jako pojivová fáze v technologii 3D tisku

Školitel: Ing. Eva Bartoníčková, Ph.D.

Školitel specialista: doc. Ing. František Šoukal, Ph.D.

Anotace: Disertační práce se zaměřuje na studium funkčně modifikovaných C–S–H gelů jako pojivové fáze v technologii 3D tisku silikátových materiálů, se zvláštním důrazem na metodu Direct Ink Writing. Výzkum je orientován na syntézu C–S–H gelů s cíleně upraveným chemickým složením a funkčními vlastnostmi, které ovlivňují jejich hydratační chování, reologické vlastnosti a odezvu materiálu v průběhu procesu 3D tisku. Pozornost je věnována vlivu funkční modifikace na vývoj mikrostruktury pojivové fáze a na její interakci s extruzními a smykovými podmínkami charakteristickými pro metodu Direct Ink Writing. Součástí práce je systematické studium vazeb mezi procesními parametry tisku, kinetikou hydratace a řízenou distribucí modifikovaných C–S–H gelů v tištěné struktuře. Cílem disertační práce je přispět k hlubšímu porozumění vztahů mezi chemickou povahou pojivové fáze a její použitelností v aditivních technologiích pro výrobu silikátových materiálů.

Název: Polovodivé heteropřechody na bázi titanu připravené z polymerních prekurzorů pro fotokatalytickou degradaci znečišťujících látek

Školitel: Ing. Eva Bartoníčková, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Vojtěch Jašek, Ph.D.

Anotace: Disertační práce je zaměřena na přípravu polovodivých heteropřechodů na bázi titanu a jejich využití ve fotokatalytických procesech. Zvolená metoda přípravy keramických materiálů pomocí polymerně odvozených prekurzorů umožňuje cílené řízení chemického složení, fázového složení a mikrostruktury výsledných materiálů, což je klíčové pro optimalizaci jejich funkčních vlastností. Fotokatalytická účinnost bude hodnocena na vybraných modelových organických polutantech s cílem objasnit vztahy mezi strukturou, vlastnostmi a funkčními parametry materiálů.

Název: Jednosložkové alkalicky aktivované systémy

Školitel: doc. Ing. Lukáš Kalina, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Vlastimil Bílek, Ph.D.

Anotace: Ve výzkumu alkalicky aktivovaných pojiv začínají být stále populárnější jednosložkové systémy („one-part“), kdy je aktivátor v pevném stavu předem smíchán s prekurzorem, takže při použití tohoto pojiva stačí jen přidat vodu, podobně jako u běžného portlandského cementu. Z praktického hlediska je vedle zažitých postupů přípravy výhodné i to, že odpadá skladování vysoce alkalických roztoků a manipulace s nimi. Určitými úskalími naopak jsou hygroscopicita aktivátoru, jeho rozpouštění ve vodě, potenciálně odlišná kinetika vzniku reakčních produktů ve srovnání s běžnými kapalnými aktivátory, ale i nízká účinnost při alkalické aktivaci, neboť se většinou používají spíše aktivátory s nižším pH a pokud možno v co nejmenších dávkách kvůli ekonomickým, ale i ekologickým aspektům. Od dvousložkových systémů se jednosložkové dále liší i reologií a funkcí přísad. Práce je proto zaměřena zejména na raná stadia alkalické aktivace jednosložkových systémů (reologie, vývoj teploty, reakční procesy, funkčnost organických přísad) a optimalizací jejich složení také vzhledem k dlouhodobým vlastnostem. Součástí práce bude i studium mikrostruktury těchto systémů a identifikace vznikajících produktů.

Název: Ne-fullerenové akceptory na bázi vysoce výkonných barviv a pigmentů pro organickou fotovoltaiku

Školitel: prof. Ing. Jozef Krajčovič, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Martin Cigánek, Ph.D.

Anotace: Práce bude zaměřena na cílenou syntézu a pokročilou chemickou modifikaci organických materiálů na bázi pigmentů a barviv, syntézou jejich polymerů a ko-polymerů pro aplikace v oblastech organické elektroniky. Design molekul bude cílen na studium vlivu chemické derivatizace na elektron-akceptorní, ale i optoelektrické vlastnosti výsledných materiálů, a to ve vztahu k cíleným aplikacím zejména v oblasti fotoniky.

Název: Organicko-anorganické a zcela anorganické trihalogenidové perovskitové materiály pro aplikace v neuromorfní elektronice

Školitel: Ing. Jan Pospíšil, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Stevan Gavranovič, Ph.D.

Anotace: Práce se bude zabývat přípravou a charakterizací různých typů perovskitových materiálů, které jsou perspektivní pro využití v oblasti neuromorfní elektroniky, tj. pro budoucí vývoj neuromorfních systémů, počítačů a pokročilých paměťových zařízení. Pozornost bude soustředěna především na charakterizaci optických a elektrických vlastností materiálů připravených ve formě tenkých vrstev. Studovány budou i možnosti využití těchto materiálů v memristivních zařízeních a studium jejich odezvy. Práce bude realizována s podporou projektu základního výzkumu a ve spolupráci s dalšími pracovišti včetně zahraničních (student bude zapojen do spolupráce s INM-CNR v Itálii a INAM ve Španělsku).

Název: Syntéza a charakterizace nových reaktivních pryskyřic jako udržitelné varianty matrice pro výrobu kompozitních materiálů

Školitel: doc. Mgr. Radek Přikryl, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Silvestr Figalla, Ph.D.

Anotace: Globální tlak na snižování ekologické zátěže a závislosti na fosilních palivech představuje jednu z největších výzev současného materiálového inženýrství, přičemž jsou v kontextu současné klimatické krize vyžadována udržitelná řešení pro průmyslové aplikace. Kompozitní materiály, které jsou nezbytné pro moderní průmysl díky své výjimečné kombinaci pevnosti, nízké hmotnosti a trvanlivosti, však často spoléhají na pryskyřičné matrice odvozené z neobnovitelných (fosilních) zdrojů, což vytváří významnou environmentální stopu. Hlavním cílem současného materiálového výzkumu je proto transformace těchto systémů, zejména vývojem nových, ekologicky šetrných pryskyřic. Inovace v tomto směru se soustředí na syntézu reaktivních prekurzorů odvozených plně či částečně z obnovitelných zdrojů a na valorizaci, tedy chemickou transformaci, komerčních materiálů nebo odpadu na hodnotné prekurzory pryskyřic. Tento přístup představuje průmyslově atraktivní cestu k udržitelnější budoucnosti kompozitních materiálů. Disertační práce se bude aktivně zapojovat do řešení této klíčové problematiky, neboť její hlavní ambicí je zavedení udržitelného přístupu k výrobě kompozitních matric. Práce bude cílit na návrh syntézy nových reaktivních pryskyřic, sloužících jako kontinuální fáze připravovaných kompozitních systémů a bude zahrnovat detailní analýzu chemické struktury a funkčních vlastností připravených reaktivních prekurzorů. Nedílnou součástí výzkumu je také studium fyzikálně-chemických vlastností syntetizovaných produktů a následné testování příslušných kompozitních výrobků z hlediska mechanických a termomechanických vlastností. Závěry práce by měly shrnout dosažené výsledky s ohledem na praktické využití a poskytnout návrh dalšího postupu, čímž přispějí k poznání v oblasti udržitelné chemie a materiálového inženýrství.

Název: Syntéza a charakterizace reaktivních systémů z obnovitelných zdrojů pro vybrané materiálové aplikace

Školitel: Ing. Silvestr Figalla, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Vojtěch Jašek, Ph.D.

Anotace: Motivace tématu disertační práce vychází z aktuální potřeby transformace chemického a materiálového průmyslu směrem k principům udržitelného rozvoje a snahy o redukci závislosti na fosilních zdrojích, které v současnosti dominují produkci syntetických polymerů. Hlavním hybným faktorem je rostoucí legislativní i společenský tlak na využívání obnovitelných surovin, které mohou sloužit jako ekologicky příznivější alternativy ke konvenčním petrochemickým monomerům, aniž by došlo ke snížení užitečných vlastností výsledných materiálů. Klíčovým aspektem výzkumu je proto návrh a syntéza nových reaktivních systémů, které by částečně nebo plně využívaly obnovitelné zdroje jako výchozí stavební bloky pro přípravu makromolekulárních látek. Zvláštní pozornost je věnována funkcionalizaci přírodních vstupů reaktivními skupinami, jako jsou akryláty a methakryláty, což umožňuje jejich následné zpracování moderními technologiemi včetně aditivní výroby či přípravy povlaků a adhesiv. Významnou vědeckou výzvu představuje zejména využití kyseliny itakonové, která jakožto biotechnologicky dostupná nenasycená dikarboxylová kyselina nabízí unikátní platformu pro syntézu plně obnovitelných pryskyřic schopných radikálové polymerace. Cílem práce však není pouze samotná syntéza, nýbrž komplexní pochopení vztahů mezi chemickou strukturou bio-prekurzorů a jejich reaktivitou, což je nezbytné pro optimalizaci vytvrzovacích procesů. Detailní studium fyzikálně-chemických charakteristik spolu s analýzou mechanických vlastností připravených reaktivních systémů má za cíl ověřit, zda jsou tyto nové materiály schopny konkurovat zavedeným komerčním produktům v určených materiálových aplikacích,

jako jsou např. aplikované reaktivní systémy, ochranné vrstvy nebo 3D tištěné prototypy, a tím přispět k širší implementaci udržitelné chemie do praxe.

Název: Vývoj a studium fotopolymerních materiálů pro pokročilé fotopolymerační technologie

Školitel: Ing. Silvestr Figalla, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Vojtěch Jašek, Ph.D.

Anotace: Fotopolymerační technologie představují důležitý nástroj pro přípravu mikro- a makrostrukturovaných polymerních materiálů s přesně řízenou geometrií a vlastnostmi. Metody založené na řízené fotopolymeraci, včetně dvoufotonové polymerace (2PP), umožňují tvorbu struktur s vysokým prostorovým rozlišením a nacházejí uplatnění v širokém spektru oblastí, od mikrooptiky a funkčních povrchů přes mikro- a nanostrukturované systémy až po medicínské aplikace. Náplní disertační práce bude výzkum možností návrhu molekulární struktury, její syntézy a modifikace vzniklých fotopolymerních materiálů a studium jejich chování při řízené fotopolymeraci. Práce se zaměří na vztahy mezi chemickou strukturou pryskyřic, jejich reaktivitou, kinetikou polymerace a výslednými fyzikálně-mechanickými a funkčními vlastnostmi vytvrzených struktur. Součástí práce bude studium vlivu složení fotopolymerních systémů (typy monomerů a oligomerů, funkční skupiny, fotoiniciátory a případná aditiva) na průběh fotopolymerace a kvalitu připravovaných struktur v různých měřítkách. Cílem disertační práce je přispět k rozšíření poznání v oblasti vysoce funkčních fotopolymerních materiálů a jejich využití v pokročilých technologiích založených na řízené fotopolymeraci.

Název: Vliv methanogenů a sulfát redukujících bakterií na korozní chování hořčíkových slitin v anaerobním prostředí

Školitel: doc. Ing. Jaromír Wasserbauer, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Leoš Doskočil, Ph.D.

Anotace: Korozní chování hořčíkových materiálů je již několik desetiletí zkoumáno v různých prostředích a bylo vyvinuto množství strategií protikorozní ochrany. Současný výzkum však opomíjí význam mikrobiálně ovlivněné koroze, která může být pro aplikace hořčíkových materiálů zásadní. V této práci bude provedeno komplexní studium koroze hořčíkových slitin v anaerobních podmínkách s cílem stanovit vliv metanogenních archeí, sulfátredukujících bakterií a jejich smíšených kultur na korozní proces. Získané výsledky povedou k formulaci prvního uceleného konceptu korozního mechanismu hořčíkových slitin v přítomnosti zkoumaných mikroorganismů. Dále bude navržen první funkční inhibitor poskytující současně ochranu proti korozi i mikrobiálnímu působení.

Název: Pokročilé materiály pro transparentní solární články

Školitel: prof. Ing. Martin Weiter, Ph.D.

Školitel specialista: Ing. Matouš Kratochvíl, Ph.D.

Anotace: Poloprůhledné organické solární články (ST-OSC) nabízejí převratnou možnost kombinovat získávání energie s ochranou před nadměrným tepelným zářením a nacházejí uplatnění jako fotovoltaická okna nebo skleníky. Klíčovou výzvou je vyvážení účinnosti přeměny energie (PCE) a průměrné propustnosti viditelného záření, což současné materiály neumožňují. Pro řešení tohoto problému budou syntetizovány nové polovodiče se silnou absorpcí FR-NIR a budou systematicky zkoumány základní elektronické procesy na molekulární úrovni, které určují jejich optoelektronické vlastnosti.

Práce se bude zabývat přípravou a charakterizací materiálů - organických polovodičů, které jsou perspektivní pro využití v oblasti organické a hybridní fotovoltaiky. V rámci práce budou metodami materiálového tisku a dalšími metodami připravovány a charakterizovány organické solární články a studovány jejich vlastnosti. Pozornost bude soustředěna především na charakterizaci optických a elektrických vlastností materiálů a solárních článků. Cílem je optimalizace vlastností solárních článků s ohledem na jejich konkrétní možnosti uplatnění. Předpokládá se zapojení doktoranda do národního výzkumného projektu se zaměřením na organickou transparentní fotovoltaiku.