**Název programu**: Chemie, technologie a vlastnosti materiálů

**Forma**: prezenční

**Název**: Jednosložkové alkalicky aktivované systémy

**Školitel**: doc. Ing. Lukáš Kalina, 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 hygroskopičnost 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 stádia 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.

**Anotace**: Práce se zabývá cílenou chemickou modifikací organických barviv a pigmentů, syntézou jejích polymerů a ko-polymerů. Dizajn molekul bude zaměřen na studium vlivu chemické modifikace na výsledné elektron-akceptorní vlastnosti materiálů pro aplikace v organické fotovoltaice.

**Název**: Pokročilé materiály pro organické a hybridní solární články

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

**Anotace**: 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 mezinárodního výzkumného projektu se zaměřením na organickou fotovoltaiku.

**Název**: Řízení prostorové distribuce hydrátů v nízkouhlíkových cementech

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

**Anotace**: Předmětem dizertační práce je výzkum hybridních alkalicky aktivovaných cementů (HAACs) nabízejících nízkouhlíková pojiva spojením portlandského cementu a alkalicky aktivovaných materiálů. Zlepšení jejich konkurenceschopnosti vyžaduje však zlepšení raných mechanických vlastností. Téma se proto zaměřuje na využití syntetických C-(A)-S-H gelů jako zárodků nukleace, které usnadňují tvorbu a prostorové rozložení hydratačních produktů, spolu s pokročilou mechanickou analýzou. Práce je součástí projektu GAČR, kde je nastavena kooperace dvou institucí, VUT bude syntetizovat C-(A)-S-H nanozárodky s různým obsahem hliníku označených pomocí těžkých kovů pro sledování jejich prostorové distribuce během hydratace pomocí chemického mapování. ČVUT na tyto výsledky naváže pomocí nanoindentace s identifikací vlastních mechanických vlastností složek HAAC pasty. To umožní mechanické modelování a porovnání s makroskopickými testy pevnosti, elasticity, smrštění a odolnosti proti trhlinám, což nakonec povede k komplexnímu pochopení vztahů mezi prostorovou distribucí vzniklých hydrátů a mechanickými chováním HAAC.

**Název**: Studium metod funkcionalizace 3D tištěných biokompozitních skefoldů pro regenerativní medicínu

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

**Anotace**: Motivace: Biokompozity na bázi termoplastické biopolymerní matrice a anorganického plniva umožňují svými vlastnostmi návrh materiálů pro výrobu biokompatibilních resorbovatelných skefoldů pro regeneraci kostní tkáně. FDM 3D tisk dnes poskytuje možnosti výroby sofistikovaných multimateriálových porézních struktur s řízenými fyzikálními vlastnostmi a to ve tvaru na míru konkrétní aplikace. Pro účinnou aplikaci skefoldu je třeba kromě biokompatibility a osteokondukce zajistit vhodné podmínky pro vaskularizaci nově vznikající tkáně. Další výzvou je zajistit řízené uvolňování růstových faktorů a případně dalších farmaceutik.

Předmětem disertační práce je návrh materiálu 3D tištěného skefoldu a studium možností jejich následné funkcionalizace s ohledem na zajištění vaskularizace a řízeného uvolňování účinných farmaceutických látek. Práce bude prováděna na modelu femuru stehenní kosti. Mechanické vlastnosti budou predikovány pomocí výpočtových modelů a verifikovány základními mechanickými zkouškami na reálných vzorcích. Experimenty řízeného uvolňování účinných látek budou prováděny na vhodných modelových zástupcích. Testy interakce s buňkami budou prováděny ve spolupráci s vybranými pracovišti, testy vaskularizace pak s CEITEC VUT. V případě uspokojivých výsledků budou provedeny testy in vivo ve spolupráci s VETUNI. Globálním cílem práce je přispět k poznání v oblasti řízení vlastností skefoldů pro regenerativní medicínu kostní tkáně pomocí chemické a fyzikální struktury 3D tištěného kompozitu.

**Název**: Využití přírodních surovin pro syntézu reaktivních materiálů pro SLA 3D tisk

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

**Anotace**: Motivace: Příprava reaktivních monomerů na přírodní bázi obsahujících epoxidové a radikálově polymerovatelné funkční skupiny. V současné době se používají sloučeniny z petrochemických zdrojů obsahující reaktivní epoxidové skupiny (epichlorhydrin), popřípadě se k výrobě speciálních epoxidů používají nebezpečné a toxické sloučeniny jako například 3-chlorperoxobenzoová kyselina. Utilizace přírodních a dostupných zdrojů pro tento typ procesů (peroxidu vodíku a jeho derivátů) může zefektivnit přípravu konkrétních materiálových prekurzorů a zároveň vyhovět požadavkům nastupující legislativy zohledňující vyšší míru udržitelnosti chemického průmyslu. U takto připravených epoxy prekurzorů lze využít jejich reakce s různými deriváty nenasycených karboxylových kyselin k přípravě reaktoplastů. Některé z těchto kyselin, které lze získat ze zcela obnovitelných zdrojů, vykazují schopnost radikálově iniciované polymerace a mohou tak sloužit jako vhodné alternativy k současným komerčně využívaným monomerům. Motivací práce je výzkum aplikovatelnosti nukleofilní substituce karboxylové skupiny epoxy skupinou pro přípravu pryskyřic použitelných pro SLA 3D tisk.

Předmětem disertační práce je studium chemických reakcí umožňujících přípravu výchozích látek spolu s jejich deriváty a jejich funkcionalizaci pro 3D tiskové technologie SLA. Součástí je i hodnocení dosažené chemické struktury, reologických vlastností pryskyřice a zejména termo-mechanických vlastností výsledného výtisku nebo odlitku. Nezbytnou součástí je i popis vlivu chemické struktury na výsledné parametry vytvrzeného materiálu. Cílem práce je přispět k poznání v oblasti produkce a vývoje reaktoplastových matric obsahujících podíl bio-složky.

**Název**: Zachycování oxidu uhličitého při výrobě portlandského cementu

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

**Anotace**: Předmětem dizertační práce bude výzkum možností zachycování oxidu uhličitého prostřednictvím karbonatace hořečnatých iontů v taveninách alkalických solí. Technologie CCS (Carbon Capture and Storage) založené na karbonataci hořečnatých minerálů a hornin nejsou doposud rozvinuté, protože efektivní karbonatace hořčíku v pevné fázi je možná pouze za vysokých teplot a tlaků. Alternativní možností výroby portlandského cementu je syntéza slínkových minerálů v tavenině alkalických solí, která probíhá za výrazně nižších teplot ve srovnání s konvenční technologií. Reaktivita hořečnatých a uhličitanových iontů v tavenině je výrazně vyšší a nabízí se tak spojení syntézy slínkových minerálů se současným zachycováním CO2 ve formě MgCO3.