

5L-01 FOSFAZENY

MILAN ALBERTI^{a*}, JIŘÍ PŘÍHODA^b, ZBYNĚK VORÁČ^a, IVAN KOTEK^c, VLADIMÍR ŠPAČEK^c, MARTIN KAŠKA^c, FRANTIŠEK SOCHA^c a LENKA DASTYCHOVÁ^d

^a Ústav fyzikální elektroniky, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ^b Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ^c Synpo, a.s., S.K. Neumanna 1316, 532 07 Pardubice, ^d Ústav chemie, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám T.G.M. 275, 762 72 Zlín
alberti@chemi.muni.cz

V případě fosfazenů se jedná o sloučeniny, jež obsahují vazebné uskupení – N = PX₂, X = halogen nebo R, RNH, RO. Syntetizovány byly poprvé v malém množství již v roce 1834 chemiky Liebigem a Wöhlerem¹, kteří připravili malá množství cyklického trimeru – hexachloro-cyklo-trifosfazenu, P₃N₃Cl₆.

Z hlediska svých chemických a fyzikálních vlastností představují fosfazenové hraniční oblast mezi anorganickou a organickou chemií. Značný rozvoj prodělala chemie těchto látek v druhé polovině 60. let 20. stol. Pozornost se soustředila na syntézu organoderivátů cyklofosfazenů, především náhradou atomů chlóru v molekule prekurzoru P₃N₃Cl₆ různými substituenty^{2,3}. Bylo zjištěno, že snadno probíhá amonolýza, většina aminolýz, reakce s alkokidy probíhají poněkud pomaleji.

Polymerní fosfazenové deriváty byly připraveny obdobně jako deriváty cyklických fosfazenů substitucí atomů chlóru v termicko polymeraci z hexachloro-cyklo-trifosfazenu vzniklého lineárního polymeru, -(N=PCL₂)_n-, n = cca 15 000, jenž je rozpustný v organických rozpouštědlech. Potenciální aplikovatelnost fosfazenových sloučenin je impozantní, díky zmíněné snadné nahraditelnosti atomů halogenů v molekulách jejich prekurzorů. Lze je využít pro přípravu hybridních cyklolineárních a cyklomatrixových polymerů, extenderů polymerních řetězců, jako jader dendrimerních struktur, modifikátory polymerů, nosičů protirakovinných léčiv, retardérů hoření, nanokompozitů, nanovláken, adheziva, apod.

V současné době jsou studovány na pracovištích, prezentujících příspěvek, možnosti příprav nových technických polymerů pro síťovatelné kompozity na bázi zmíněných anorganických polymerů a jejich prekurzorů s vybranými klasickými polymery, jako jsou například polyurethany, polyester, epoxidy, polymethakryláty, polyamidy a dalšími, rovněž i s vybranými silikony a silazany.

Tato práce vznikla za podpory projektů MPO ČR FR-TI/413 a MŠMT 0021622411.

LITERATURA

1. Allcock H. R.: *Chemistry and Applications of Polyphosphazenes*. J. Wiley, Hoboken, New Jersey 2003.
2. Gleria M., De Jaeger R.: *Phosphazenes a Worldwide Insight*. Nova Science Publishers, Inc. Hauppauge, New York 2004.
3. De Jaeger R., Gleria M.: *Inorganic Polymers*. Nova Science Publishers, Inc. Hauppauge, New York 2007.

5L-02 ENHANCED ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF LiFePO₄ CATHODE MATERIAL BY PPY/PEG COATING

ANDREA FEDORKOVÁ^{a*}, RENÁTA ORIŇÁKOVÁ^b, ANDREJ ORIŇÁK^b, ANDREAS HEILE^c, DUŠAN KANIANSKY^a, and HEINRICH F. ARLINGHAUS^c

^a Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, Comenius University, Mlynská Dolina, 842 15 Bratislava 4, ^b Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Moyzešova 11, 041 54 Košice, ^c Institute of Physics, Westfälische Wilhelms University, Wilhelm-Klemm-Str. 10, DE-481 49 Münster
fedorkova@fns.uniba.sk

Rechargeable lithium batteries are now used extensively for a wide variety of applications, from portable electronic devices to hybrid and electric vehicles. During the past few years, LiFePO₄ has received growing attention as a promising cathode material for lithium ion batteries. Bare LiFePO₄ is an insulator with electrical conductivity of about ~10⁻¹¹ S cm⁻¹. One of the approaches to increase electrical conductivity of LiFePO₄ is coating with conducting polymers¹. Polypyrrole (PPy) is a conducting polymer which also acts as a host material for Li⁺-ion insertion/extraction². In this work, polyethylene-glycole (PEG) is introduced into PPy film coated on LiFePO₄ powder particles to promote the properties of cathode material for Li-ion batteries. The enhancement of the electrochemical activity by the substitution of carbon with electrochemically active polymer is investigated. The electrochemical performance of PPy-LiFePO₄ electrodes was greatly improved by introduction of PEG into the PPy films³. Charge/discharge measurements confirmed the increase in capacity when applying PEG in PPy. The morphology and particle sizes of the prepared cathode powder material were investigated by scanning electron microscopy (SEM) and particle size analysis (PSA). Distribution of PPy and PPy/PEG films onto the LiFePO₄ particles surface was studied by time of flight secondary ion mass spectrometry (TOF-SIMS). TOF-SIMS measurements and SEM images confirmed that thickness of polypyrrole coating on LiFePO₄ particles is about 100 nm.

The authors wish to thank Slovak Grant Agency VEGA grant No. 1/0043/08 and No. 1/0134/10.

REFERENCES

1. Wang G. X., Yang L., Chen Y., Wang J. Z., Bewlay S., Liu H. K.: *Electrochim. Acta* 50, 4649 (2005).
2. Osaka T., Momma T., Nishimura K., Kakuda S., Ishii T.: *J. Electrochem. Soc.* 141, 1994 (1994).
3. Fedorková A., Oriňáková R., Oriňák A., Talian I., Heile A., Wiemhöfer H. D., Kaniansky D., Arlinghaus H. F.: *J. Power Sources* 195, 3907 (2010).

5L-03

FÁZOVÉ PŘECHODY AMORFNÍCH LÁTEK
VE SKELNÉM A KAPALNÉM STAVUBOŘIVOJ HLAVÁČEK, ANDREA KALEDOVÁ
a DAVID VESELÝ

Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
borivoj.hlavacek@upce.cz

Fázové přechody týkající se přeměny pevná látka–kapalina, budou probrány v širokém rozsahu teplot a tlaků a to vzhledem k nelineárním vibracím jednotlivých molekul a předpokládané vznikající heterogenitě amorfní fáze^{1–3}.

Vibrace jednotlivých molekul či atomů a dalších alternativních subjednotek budou uvažovány jako nelineární oscilátory podléhající pravidlům platícím pro vibrační pohyby, které se řídí pravidly určovanými a převzatými z teorie chaosu^{4–6}. V této souvislosti budou probrány obecné principy neurčitosti pohybu nelineárních oscilátorů a pomocí nich následně zodpovězeny základní otázky vzniku amorfní fáze a jejího přechodu do kapaliny či tuhé fáze pomocí zániku či nárůstu střížného modulu. Pro vyšší teploty a vyšší fázové přechody, jako je bod varu či kritická teplota, předložená teorie vibrací zahrnuje heuristicky uvažované trojrozměrné modelové představy základních stavových rovnic jako je rovnice Peng-Robinsonova, rovnice Dietericiho či Van der Waalsova. Plyn v kontrastu vůči kapalině pak vychází jako heterogenní látka vyplněná jednotlivými molekulami, které se pohybují bez vibračních ohnisek. Tento jev případně kapaliny neplatí, a je charakterizován vysokým počtem vibračních ohnisek rovnajících se přibližně počtu molekul. U nízkých teplot předvedeme molekulární modely přechodu kapalina–pevná látka a následně bude pro okolí teploty nástupu skelného stavu T_g vysvětlen vznik volného objemu nad teplotou T_g , a to vlivem nespojitosti vibračních amplitud. V celkovém přístupu bude zejména zdůrazněna nerovnováha fyzikálního děje zeskelnění a nezbytnost vytvoření nepravidelné a nerovnovážné struktury nelineárními oscilacemi.

LITERATURA

1. Angel C. A.: *Science* 267, 1615 (1995).
2. Novikov V. N., Ding Y., Sokolov A. P.: *Phys. Rev. E* 71, 1 (2005).
3. Malinovsky V. K., Surovtsev N. V.: *Glass Phys. Chem.* 26, 217 (2000).
4. Hlaváček B., Šesták J. in book: *Some Thermodynamic, Structural and Behavioral Aspects of Materials Accentuating Noncrystalline States*, chap. 18, p. 388. OPS Nymburk, Plzeň 2009.
5. Hlaváček B., Mareš J.: *Fyzika struktur amorfních a krystalických materiálů*, Universita Pardubice, Fyzikální Ústav AV ČR. Pardubice 2007.
6. Pain H.J.: *The Physics of Vibrations and Waves*. Wiley, New York 1993.

5L-04

PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI UMĚLÝCH PÍSKOVců
NA BÁZI GEOPOLYMERNÍCH POJIVPETR KOUTNÍK^a, OLEG BORTNOVSKY^a, PETR
ANTOŠ^a a PAVEL ROUBÍČEK^b

^a Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 1521/84, 400 01 Ústí nad Labem, ^b České lupkové závody, a. s., 171 01 Nové Strašecí
petr.koutnik@vuanch.cz

Příprava a zkoumání vlastností umělých pískovců byly prováděny v rámci rozsáhlého výzkumu zaměřeného na vývoj a aplikace materiálů vhodných pro restaurování historických památek. Pro opravy pískovcových artefaktů se zpravidla používají pojiva obsahující cement či dokonce pojiva na organické bázi. Umělé pískovce pojené těmito typy pojiv pak mají výrazně jiné chemické složení a fyzikální vlastnosti ve srovnání s pískovci přírodními. Možnou alternativou se jeví použití geopolymerních pojiv, které vznikají alkalickou aktivací hlinitokřemičitanů hydroxidem sodným či draselným za přítomnosti kapalných alkalických křemičitanů. Reakcí vzniká třídímní struktura, která je svým chemickým složením podobná zeolitům, avšak na rozdíl od nich je amorfní. Pokud použita hlinitokřemičitá surovina není zcela přeměněna na gelovou fázi, nebo pokud jsou přidána nerozpustná plniva, pak nerozpuštěné částice a částice plniva zůstávají pevně zachycené v pojivu. Této vlastnosti geopolymerního pojiva lze přídavkem vhodného plniva využít k modifikaci vzhledu geopolymerního pojiva, který tedy může být velice podobný vzhledu restaurovaného prvku.

Postup přípravy umělých pískovců spočíval v mísení geopolymerního pojiva s křemenným pískem a dusáním vzniklé směsi do formy. Po cca jednom měsíci byla ze zatvrdlého výdusku vyřezána zkušební tělesa a určeny základní fyzikální vlastnosti (pevnosti, nasákavost, objemová hmotnost atd.). Celkem byly připraveny tři umělé pískovce, které se lišily druhem pojiva a zrnitostí i obsahem plniva. Pískovce měly vzhled odpovídající svým přírodním analogům a významně se vzájemně lišily v pevnostech, nasákavosti, součiniteli nasákavosti a řadě dalších vlastností. Bylo prokázáno, že na bázi geopolymerních pojiv lze připravit umělé pískovce pokrývající v širokém rozsahu vlastnosti pískovců přírodních.

Tato práce vznikla při řešení projektu „Pokročilé materiály a technologie pro rekonstrukce historických budov“ ev. č. FT-TA4/070, který byl realizován za finanční podpory ze státních prostředků prostřednictvím Ministerstva průmyslu a obchodu.

5L-05

KONTINUÁLNÍ SLEDOVÁNÍ KONDUKTIVITY PŘI REAKCI MEZI KŘEMIČITANEM A HYDROXOHLINITANEM VE VODNÉM ROZTOKU**JAROSLAV MELAR*, VRATISLAV BEDNAŘÍK a MILAN VONDRUŠKA**

Ústav inženýrství ochrany životního prostředí, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám. TGM 275, 762 72 Zlín
melar@ft.utb.cz

Polykondenzační reakce křemičitanu SiO_3^{2-} s hydroxohlinitanem $[\text{Al}(\text{OH})_4]^-$ je pravděpodobným mechanismem vzniku geopolymerů – amorfních hlinitokřemičitých materiálů, poprvé blíže studovaných Gluchovskim¹ a poté podrobně zkoumaných Davidovitsem². Uvedená reakce je v tomto případě vzhledem k lepší reprodukovatelnosti měření zkoumána ve vodném alkalickém prostředí. Jak ukazují výsledky předchozích prací^{3,4}, je rychlost této reakce závislá na koncentraci výchozích složek, jejich vzájemném poměru, teplotě, pH a také způsobu provedení. Právě způsob provedení reakce se ukazuje být velmi důležitým faktorem pro rychlost reakce⁵. Existují dvě možnosti provedení reakce lišící ve způsobu přidávání vodního skla do reakce. Oba tyto způsoby byly důkladně zkoumány. Jednou z měřených veličin byla konduktivita, kdy se zjišťovalo, jak se její hodnoty v průběhu reakce mění pro různé reakční podmínky. Bylo zjištěno, že se průběh závislosti konduktivity na čase pro oba způsoby provádění reakce výrazně liší. V předešlých publikacích⁶ bylo rovněž diskutováno, jakým způsobem se mění vodní sklo po přidání určitého množství roztoku hydroxidu. Při porovnání výsledků měření konduktivity při obou pracovních postupech s výsledky studie chování vodního skla v silně alkalickém prostředí pak vyplývá, že právě změny ve strukturním složení vodního skla mají vliv na rozdílný průběh závislosti konduktivity na čase.

Tato práce vznikla za podpory interního grantu UTB ve Zlíně č. IGA/8/FT/10/D financovaného z prostředků specifického vysokoškolského výzkumu.

LITERATURA

1. Gluchovskij V. D., v knize: *Gruntosilikaty*, kap. III, s. 56. Gosstrojizdat, Kyjev 1959.
2. Davidovits J., v knize: *Geopolymer Chemistry & Applications*, kap. II, s. 59. Institut Géopolymère, Saint-Quentin 2008.
3. Bednařík V., Vondruška M., Slavík R., Melar J.: In. *Chem. Mech.* 6, 75 (2008).
4. Bednařík V., Vondruška M., Slavík R.: In. *Chem. Mech.* 6, 327 (2008).
5. Melar J., Bednařík V., Vondruška M.: *18. konference Aprochem. Milovy, 20.-22.4.2009.*
6. Iler R. K., v knize: *The Chemistry of Silica*, kap. 2, s. 116. John Wiley, New York 1979.

5L-06

KLÍČOVÁ ROLE VODY V CHYTRÝCH BIOAKTIVNÍCH POLYMERNÍCH SYSTÉMECH TERMO-RESPONZIVNÍHO CHARAKTERU**MILOSLAV MILICHOVSKÝ**

Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Oddělení dřeva, celulózy a papíru, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
miloslav.milichovsky@upce.cz

Stimuli-responzivní polymerní látky přitahují v současné době značnou pozornost. Jedná se o hydratované systémy retikulárního charakteru (HRS), jejichž společnou vlastností je tepelná odezva resp. citlivost na teplotu. Obvykle čirý roztok polymeru při jeho zahřívání po překročení teploty tzv. LCST (Lower-Critical Solution Temperature) přejde do gelového stavu¹. V případě hydratovaných zesíťovaných polymerů dochází k jejich odbotnání², k synerezi. Tyto procesy jsou zcela reversibilní a mírně endotermní. Vedle takovýchto HRS s LCST odezvou však existují i systémy s opačnou tepelnou odezvou – UCST (Upper-Critical Solution Temperature)³. Sem též patří již delší dobu známé hydratované submicroretikulární systémy se slabým vazebným systémem, které z tohoto důvodu ředěním koacervují – kvasi-hydrogelové systémy na bázi UF předkondenzátů⁴. Obdobně se též chovají i HRS tvořené vlákny celulóзовého charakteru, které se vyznačují specifickou vlastností při sedimentaci tzv. rheosedimentací⁵. Tyto pak ředěním flokulují, ale logicky nevykazují tepelnou odezvu na rozdíl od samotných vláken hydrogelové povahy, které vykazují LCST aktivitu.

Prezentované vysvětlení chování těchto systémů je založeno na důležité roli vody v jejich chování prostřednictvím relativně slabých hydratačních sil a vycházející z tzv. SCHL teorie⁶. Hydratační síly jsou silně závislé na teplotě, přičemž s jejím růstem klesají. Repulsivní hydratační síly tak udržují v napjatém stavu přirozenou spirálovitou strukturu polymerního řetězce při teplotě pod LCST zatímco nad LCST již na to nestačí. U UCST systému je tomu naopak. Přirozená cca lineární struktura polymerního řetězce je zde naopak ztláčována působením atraktivních hydratačních sil při teplotě pod UCST, zatímco nad touto teplotou dojde vlivem jejich oslabení k jejímu uvolnění. Porušení rovnováhy působením přitažlivých a odpuzivých sil v kvasi-hydrogelových systémech jejich ředěním, je pak klasickým příkladem uplatnění a fluktuace hydratačních sil⁴ v závislosti na teplotě.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 0021627501.

LITERATURA

1. Mano J. F.: *Adv. Eng. Materials* 10, 515 (2008).
2. Zhang X., Wang F., Chu Ch.: *J. Mat. Sci.: Materials in Medicine* 14, 451 (2003).
3. Xin-Cai Xiao, Liang-Yin Chu, Sen-Mei Chen, Jia-Hua Zhu: *Polymer* 46, 3199 (2005).
4. Milichovský M.: *Cell. Chem. Technol.* 26, 607 (1992).
5. Milichovský M., Češek Bř.: *Cell. Chem. Technol.* 38, 385 (2004).

6. Milichovský M.: Sci. Pap. Univ. Pardubice 56, 123 (1992/93).

5L-07**ANTIBACTERIAL POLYVINYL CHLORIDE PRE-TREATED BY BARRIER DISCHARGE PLASMA**

IGOR NOVÁK, AHMAD ASADINEZHAD, MARIAN LEHOCKÝ, IVAN CHODÁK, MARIAN ŠTEVIAR, ANTON POPELKA, and ANGELA KLEINOVÁ

Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava
igor.novak@savba.sk

Polyvinyl chloride was surface modified to improve bacterial adhesion prevention properties¹⁻⁴. This was fulfilled by surface activation by surface barrier discharge plasma followed by radical graft copolymerization of acrylic acid. Three known antibacterial agents, bronopol, benzalkonium chloride, and chlorhexidine, were then individually coated onto functionalized surface to induce biological properties. Various modern surface probe techniques were employed to explore the effects of the modification steps. *In vitro* bacterial adhesion and biofilm formation assay was performed.

The bacterial adhesion phenomenon is a dynamic process, but the results are evaluated herein after 24 h incubation for a better assessment of the biofilm formation. Regarding the adherence degree of *Staphylococcus aureus* onto the samples, no decrease is observed in the number of viable colonies adhered onto the surface of some samples compared to the control sample implying the inefficiency of the modifications in reducing the adherence of *Staphylococcus aureus* onto the surface. However, an inhibition in antibacterial test suggests the capability of antibacterial compound in hampering adhesion of gram-positive strain. Two factors seem determining in the adherence degree trend, i.e. wettability and surface topography. The adhesion degree is found to correlate with the hydrophilicity, and roughness of the samples.

Escherichia coli strain was found to be more susceptible to modifications rather than *Staphylococcus aureus* as up to 85% reduction in adherence degree of the former was observed upon treating with above antibacterial agents, while only chlorhexidine could retard the adhesion of the latter by 50%. Also, plasma treated and graft copolymerized polyvinyl chloride was markedly effective to diminish the adherence of *Escherichia coli*.

Táto práca vznikla za podpory grantu MŠ SR a SAV, projekt VEGA, č. 2/7103/2.

REFERENCES

- Lehocký M., Drnovská H., Lapčíková B., Barros-Timmons A. M., Trindade T., Zembala M., Lapčík L. Jr.: Coll. Surf., A 222, 125 (2003).
- Novák I., Pollák V., Chodák I.: Plasma Proces. Polym. 3, 355 (2006).
- Speranza G., Gottardi G., Pederzoli C., Lunelli L., Canteri R., Pasquardini L., Carli E., Lui A., Maniglio D., Brugnara M., Anderle M.: Biomaterials 25, 2029 (2004).

4. Triandafillu K., Balazs D. J., Aronsson B.O., Descouts P., Quo P. T., van Delden C., Mathieu H. J., Harms H.: Biomaterials 24, 1507 (2003).

5L-08**VYUŽITÍ TEPLÁRENSKÉ STRUSKY A KALU Z LEŠTĚNÍ A BROUŠENÍ SKLA PŘI PŘÍPRAVĚ GEOPOLYMERŮ**

JANA OPRAVILOVÁ, ROMAN SLAVÍK*, VRATISLAV BEDNAŘÍK a MILAN VONDRUŠKA

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství ochrany životního prostředí, Náměstí T.G.M. 275, 762 72 Zlín
slavik@ft.utb.cz

V posledních letech lze pozorovat rostoucí zájem o oblast anorganických polymerních hliníkokřemičitanových materiálů, které jsou připravovány polykondenzační reakcí v zásaditém prostředí za normální teploty a tlaku. Vzniklý materiál je označován jako geopolymer. Pro jejich přípravu jsou nejčastěji využívány přírodní vrstevnaté hliníkokřemičity (fylosilikáty) ale i různé vedlejší produkty a odpady¹⁻³.

Práce se zabývá možností využití teplárenské strusky a kalu z leštění a broušení skla při přípravě geopolymerů buď jako plniva nebo jako hlavní suroviny. S ohledem na příznivé chemické složení obou materiálů lze předpokládat, že je bude možné použít při přípravě technicky aplikovatelných materiálů.

Kaly z leštění a broušení skla, vznikající například při výrobě zrcadel a opracování skla, jsou produkovány prakticky celosvětově. Potenciální obsah organických látek (brusné oleje), olova (opracování olovnatého skla), případně dalších kovů vede k jejich ukládání na skládky odpadů.

Při spalování uhlí v elektrárnách a teplárnách je produkována řada vedlejších produktů (například v ČR asi 14 milionů tun/rok)⁴, z nichž je celosvětově využíváno pouze asi 20–30 % (cit.^{5,6}). Zužitkování těchto odpadů by přineslo významné snížení environmentální zátěže a při jejich použití jako druhotných surovin lze dosáhnout výrazného snížení nákladů například při výrobě stavebních hmot.

Výsledky práce nasvědčují, že teplárenskou strusku lze použít jako základní reakční surovinu, avšak kal z leštění a broušení skla jen jako plnivo. Vzhledem k vysoké alkalitě kalu byla studována i možnost jeho použití jako náhrady části alkalického křemičitanového roztoku nebo reaktivní suroviny.

Tato práce vznikla za podpory interního grantu UTB ve Zlíně č. IGA/2/FT/10/D financovaného z prostředků specifického vysokoškolského výzkumu.

LITERATURA

- Hardjito D., Rangan B.V.: Vijaya (2005), http://espace.lis.curtin.edu.au/archive/00000623/01/Research_Report_GC1-2005.pdf, staženo 7.1.2007.
- Asokan P., Saxena M., Asolekar S. R.: Res., Cons. and Rec. 43, 239 (2005).
- Slavík R., Bednařík V., Vondruška M., Němec A.: J. Mater. Process. Tech. 200, 265 (2008).
- http://www.cideas.cz/free/okno/technicke_listy/1uvt/2323.pdf, staženo 5.2.2009

5. Fernández-Jiménez P., Palomo A.: *Fuel* 82, 2259 (2003).
6. Slavík R., Bednařík V., Vondruška M.: *Odpady* 2006, 19.

5L-09**THE POSSIBLE APPLICATIONS OF OPTICAL SPECTROSCOPY AND PHOTOACOUSTICS FOR EVALUATION OF PRINTED CONDUCTIVE THIN LAYERS**

**NIKOLA PEŘINKA, MARKÉTA DRŽKOVÁ,
and JIRÍ KLÍMA**

*Katedra polygrafie a fotofyziky, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
nikola.perinka@hotmail.com*

In 2000, the Nobel Prize in Chemistry was awarded for the revolutionary discovery and development of conductive polymers. Since the conductive polymers can be dispersed in liquid coating systems, the new field of electronic (functional) applications was enabled. This area of development is nowadays concerned as printed electronics, because the printing is the main technology which makes the conductive polymers applicable.

In the current time, the printed functionalities are still becoming more on their significance. For these reasons, different approaches for the evaluation of properties of printed layers need to be taken into account. For obtaining a good functionality of the printed thin layers and consequently devices reliability, the physical properties of the layers and transitions between the layers must be observed. As an example of parameters, which may determine the resulting properties of the printed functionality, the thickness and the surface morphology of the printed layers can be mentioned. These characteristics of the thin printed layers can be evaluated by means of different methods; for instance using the mechanical or laser profilometers. By using these methods various difficulties can be faced during the measurements. Good example is the fact that the unevenness of the substrate could easily affect the result of the measurement. This could be possibly eliminated by applying methods sensitive to suitable properties of conductive layers themselves.

This work investigates possible applications of two optical methods, optical UV-VIS spectroscopy and the photoacoustics, for the evaluation of the properties of printed conductive layer. The examined materials are represented by the conductive ink on the base of PEDOT:PSS and the Ag-based conducting past, which were deposited on commercially available PET substrates.

In this work, it has been shown that both methods, the UV-VIS spectroscopy and the photoacoustics, can be applied for the assessment of the thickness of PEDOT:PSS based conductive layers. However, the UV-VIS spectroscopy can be sometimes easily affected by the interference of substrate. The photoacoustics, in contrast to the UV-VIS does not handle with such difficulties as the interference. Also the Ag-based ink can be evaluated by using the photoacoustics, but here, the research is now still opened to be continued.

Tato práce vznikla za podpory MSM0021627501.

5L-10**OPTICKÉ A ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI KOMPOZITŮ POLOVODIVÝCH POLYMERŮ S PLASMONOVÝMI NANOČÁSTICEMI**

JIRÍ PFLEGER, KLÁRA HALAŠOVÁ, ONDŘEJ DAMMER, SAMRANA KAZIM a AHMED SHARF

*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6
pfleger@imc.cas.cz*

Nanočástice některých drahých kovů (Au, Ag) vykazují lokální zesílení optických polí způsobené rezonančními interakcemi povrchových plasmonů (kolektivních oscilací volných elektronů) s dopadajícím světlem. Tyto rezonanční procesy mohou zesílit různé fotofyzikální procesy v molekulách sorbovaných na povrchu nanočástic, např. fotochromní konverzi nebo fotoindukovaný přenos náboje, lokálně zesílovat nebo zhasět fluorescenci. Kompozitní polymerní materiály s plasmonovými nanočásticemi jsou využitelné v celé řadě optoelektronických aplikací, ve kterých je požadována lokalizace optického pole: např. u fotochromních paměťových elementů, Ramanovských spektrálních sond a apod. Plasmonové nanočástice výrazně ovlivňují přenos náboje na rozhraní donoru a akceptoru a mohou lokálně zvýšit optickou absorpci ve funkčních molekulárních centrech v blízkosti nanočástice. Zvláště velkého zesílení lze docílit na molekulách umístěných ve fraktálních agregátech nanočástic nebo uvnitř dimerů vázaných nanočástic. V případě polymerních fotovoltaických článků přispívají nanočástice k "fotonovému managementu", který zajistí efektivní využití absorbovaných fotonů při konverzi na elektrickou energii.

Tento příspěvek se zabývá různými způsoby přípravy kompozitů p-konjugovaných polymerů s plasmonovými nanočásticemi a jejich optickými a elektrickými vlastnostmi. Byly připraveny kompozity Au a Ag nanočástic s polovodivými polymery na bázi poly[2-methoxy-5-(2-ethylhexyloxy)-1,4-fenylenevinylenu], MEH-PPV, poly(3-hexylthiofenu), P3HT, a poly(3-oktylthiofenu), P3OT, s objemovou koncentrací nanočástic v intervalu 0,1–20 %.

Pomocí SERS měření bylo prokázáno, že thiofenová skupina polymeru má dostatečnou afinitu k povrchu Au nanočástic a v kompozitu dochází k náhradě původního amoniového stabilizátoru polymerem. U polythiofenů derivatizovaných imidazoliovými a pyridiniovými skupinami byla pozorována tvorba agregátů s velmi vysokým zesílením Ramanova rozptylu. Přítomnost nanočástic zvyšuje stabilitu elektrické vodivosti při vyšších teplotách.

Byly připraveny dva typy fotovoltaických článků: se Schottkyho bariérou a objemovým donor-akceptorovým heteropřechodem na bázi rozpustných derivátů polythiofenu a fullerenu s Au nanočásticemi. Ve druhém typu článků bylo pozorováno zvýšení vnější fotoelektrické účinnosti fotoelektrické konverze absorbovaných fotonů.

Tato práce vznikla za podpory projektu č. KAN100500652 programu výzkumu a vývoje "Nanotechnologie pro společnost".

5L-11

EFFECTS OF SOME RADIATION ENERGIES ON POLYAMIDE 6 AND GLASS FIBER-REINFORCED POLYAMIDE 6**MÁRIA PORUBSKÁ^a, ONDREJ SZÖLLŐS^b, DRAGAN BABIĆ^c, IVICA JANIGOVÁ^d, KLAUDIA JOMOVÁ^a, and IVAN CHODÁK^d**

^a Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Constantine The Philosopher University in Nitra, Tr. A. Hlinku 1, 949 01 Nitra, ^b Biont, a.s., Karloveská 63, 842 29 Bratislava, ^c Institute of Nuclear sciences "Vinca", PO Box 522, 11001 Belgrade, ^d Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava
mporubska@ukf.sk

Development of radiation technologies has allowed chemical modification of polymers also in solid state, what is advantageous particularly for polymers of high melting temperature. Initiation of crosslinking is one of the favorite modification procedures applying irradiation of various types. From this point of view, engineering plastics should be considered since stability of strength, impact, dimensional and other properties are required and can be considerably improved by network formation. Polyamides (PA) are typical examples of this group of materials; nevertheless crosslinking of polyamides is rarely described in scientific literature, especially if dealing with reinforced PA with e.g. glass fibers.

Therefore, the goal of this work consists in a comparison of the effect of various modes of irradiation on properties of glass-fiber reinforced PA-6 with different glass fiber lubrication, while also neat PA-6 was investigated. Electron beam, gamma rays and proton beam have been used for initiation of crosslinking at ambient temperature. Determining mechanical properties, crosslinked gel portion, thermal characteristics, and infra-red spectroscopy, variation of structure due to irradiation was estimated. It was concluded that generally crosslinking has similar effect regardless on the way of initiation, but different parameters vary considering the absorbed dose. Thus, the ultimate properties depend on the mode of irradiation as well as irradiation dose while the presence or absence of the reinforcing filler is also important.

This work was sponsored by the Slovak Research and Development Agency under Grant APVV-51-010405.

5L-12

VYTĚŠŇOVACÍ PRANÍ SULFÁTOVÉ BUNIČINY**FRANTIŠEK POTŮČEK^a, SHELLY ARORA^b
a JOZEF MIKLÍK^a**

^a Univerzita Pardubice, FChT, ÚChTML, 532 10 Pardubice,
^b Punjabi University, Department of Mathematics, Patiala 147002, Punjab, India
frantisek.potucek@upce.cz

Statická vrstva nebělené sulfátové buničiny představuje poměrně komplikovaný systém sestávající z polydisperzních,

stlačitelných vláken s vnitřní dutinou, tzv. lumenem. Navíc zvláště v alkalickém prostředí vlákna bobtnají a anorganické látky, ale i lignin se tak nacházejí ve stěně vláken. Vytěšňování výluhu tedy nelze redukovat pouze na náhradu výluhu z prostoru mezi vlákny prací vodou, nýbrž je třeba uvažovat i vyluhování látek z vláknenných stěn, což je velice pomalý děj.

Informace o průběhu vytěšňovacího praní se získají pomocí metody vzruchu a odezvy¹, kdy do vrstvy se zavede skokový vstupní signál. Odezvou je tzv. prací křivka, což je časová závislost koncentrace sledované látky, např. ligninu, v proudě vystupujícím z vrstvy buničiny.

Vytěšňovací praní tedy představuje neustálený děj. Řešením materiálové bilance sledované látky lze odvodit bezrozměrné Péceletovo kritérium, jež charakterizuje tvar prací křivky. Detailnější matematický model však navíc zahrnuje i sorpční jevy a sdílení hmoty ve stěnách vláken².

Průběh prací křivky není ovlivněn pouze geometrickými vlastnostmi vrstvy (např. tvar vláken a jejich měrný povrch, mezerovitost), ale také vlastnostmi prací kapaliny. Ke zvýšení účinnosti praní přispěla přítomnost polymeru v prací vodě v malém množství, řádově v jednotkách g v m³, což vedlo ke změně mobility prací kapaliny³. Rovněž i přidavek jiných látek, jako například močoviny, do prací vody vedl ke zvýšení účinnosti praní, neboť se snížila tloušťka vrstvy kapaliny imobilizované na povrchu vláken, a tím vzrostla průměrná efektivní mezerovitost vrstvy a více výluhu tak bylo odstraněno mechanismem vytěšnění⁴. Vedle toho byly také pozorovány výrazné rozdíly při praní buničiny uvařené z jehličnanů, nebo z listnáčů, kdy vlákna se lišila nejen svou velikostí, ale také morfologickými vlastnostmi a chemickým složením.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR v rámci výzkumného záměru MSM 0021627501.

LITERATURA

1. Levenspiel O.: *Teorie a výpočty reaktorů*. SNTL, Praha 1967.
2. Arora S., Potůček F.: *Braz. J. Chem. Eng.* 26, 385 (2009).
3. Potůček F., Marhanová M.: *Cellul. Chem. Technol.* 36, 527 (2002).
4. Potůček F., Pulcer M.: *Chem. Pap.* 60, 365 (2006).

5L-13

IONTOVÉ KAPALINY – ELEKTROLYTY PRO BEZPEČNÉ LITHNO-IONTOVÉ BATERIE**JAKUB REITER^{a*}, MARTINA NÁDHERNÁ^a
a ROBERT DOMINKO^b**

^a Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i., 250 68 Řež,
^b National Institute of Chemistry, Ljubljana
reiter@iic.cas.cz

Komerčně dostupné lithno-iontové baterie obvykle obsahují elektrolyt s těkavými a hořlavými organickými rozpouštědly a jedovatý LiPF₆. Vzhledem k vysoké koncentraci energie v baterii a vysokému riziku vzplanutí nebo explozi při nesprávném používání je vysoce aktuálním tématem hledání bezpečnějších komponent. Cílem našeho výzkumu je sestave-

ni bezpečné 3 V Li-ion baterie s potenciálem použití v hybridních vozidlech (HEV) a elektromobilech (EV). Nahrazení organických rozpouštědel iontovými kapalinami na bázi imidazolia, pyrrolidinia a piperidinia je jedním z řešení. Zvolené iontové kapaliny jsou vysoce tepelně stabilní (do 400 °C), nehořlavé, elektrochemicky stálé a přátelské vůči životnímu prostředí¹.

Náš současný výzkum se zaměřil na přípravu a testování iontových kapalin s $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$, který je perspektivním materiálem kladné elektrody² díky nízké ceně a pracovnímu potenciálu 3,5 V. Nevýhodou je nízká vodivost, která vyžaduje operační teplotu 60 °C. Jako anodový materiál byl použit grafit pro vhodnou pracovní napětí a dobrou kapacitu.

Připravené iontové kapaliny bis(trifluoromethansulfonyl)imid 1-butyl-2,3-dimethylimidazolia BMMI TFSI a 1-butyl-1-methylpyrrolidinia $\text{PYR}_{14}\text{TFSI}$ jsou elektrochemicky stálé do 5 V vs. Li/Li^+ a při 60 °C mají vodivost a viskozitu srovnatelnou s elektrolyty na bázi organických rozpouštědel³.

Galvanostatické testy³ s $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ ukázaly vysokou stabilitu během procesu nabíjení a vybíjení a kapacitu 110 až 130 mAh g^{-1} . U grafitu⁴ v současné době řešíme otázku stability organického kationtu při potenciálu blízkého 0 V vs. Li/Li^+ . Použité iontové kapaliny jsou chemicky stálé ve styku s lithiem i lithiovaným grafitem, ale při potenciálech 0–0,5 V dochází k reverzibilní ko-interkalaci kationtů PYR_{14}^+ a BMMI^+ do struktury grafitu. Řešením je použití speciálních aditiv, které tento nežádoucí jev potlačuje⁵ a které jsou kompatibilní s $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$.

Tato práce vznikla za podpory Akademie věd ČR (AV0Z40320502) a MŠMT ČR (LC 523).

LITERATURA

- Ohno H. (Ed.): *Electrochemical Aspects of Ionic Liquids*, Wiley-Interscience, New York 2005.
- Dominko R.: *J. Power Sources* 184, 462 (2008).
- Nádherná M., Dominko R., Hanzel D., Reiter J., Gabersček M.: *J. Electrochem. Soc.* 156, 619 (2009).
- Nádherná M., Dominko R., Gabersček M., Reiter J.: *216th ECS Meeting, Vídeň, Rakousko, 4.–9.10.2009*, abstrakt 519.
- Nádherná M., Reiter J., Dominko R.: *J. Power Sources*, připravováno.

5L-14

MODIFICATION OF FIBRE-FORMING POLYMERS FOR PREPARATION SPECIAL COMPOSITE MATERIALS

EVA RUŽINSKÁ

*Technical University in Zvolen, Študentská 26, 960 53 Zvolen
evaruzin@vlsd.tuzvo.sk*

Prognoses of chemical fibres development indicate that the rate of fibre forming polymers with specific properties increases, e.g. ultra-fine fibres utilizable in composite materials or in connection with wooden materials for developing special wood products (uphstery, supporting material)^{1,3}.

Polymers suitable form preparation of fibre-forming mixtures (PP/PA6) are thermodynamic intolerant systems preventing formation of homogenous system. Thus they cause phase interface as a result of enthalpy system increment in polymer mixing. Stability of created phase morphology depends extensively on interfacial agent addition securing improved dispersability and increased components adhesion on the phase interface, and thereby also improvement of physical-mechanical properties of polymer system^{2,3}.

The aim of the paper is a study of interfacial agent influence (PP-MAH) added to the polymer system (polypropylene-polyamide 6) and the assessment of their fibre-forming properties (by Ostwald de Wael rheological two-parameter model and Carreau three-parameter model)⁴. Rheological properties of fibre-forming mixtures were assessed from the point of view of components representation influence and interfacial agent content (0–5 % wt.) at changing content of PP and PA6 components⁵. At the same time morphological structure (used methods: REM, SALS, FT-IR, röntgenography) and chosen physical-mechanical properties of prepared mixture fibres was studied^{6,7}. Experimentally it was demonstrated, that interfacial addition (4 % wt.) improves the level of disperse and adhesion on phase interface, whereby it prevents porous formation and enables the production of fibrous materials with matrix-fibrous structure, applicable also for special composite wooden materials¹.

Research was supported of Slovak Ministry of Education, No. 1/0841/08.

REFERENCES

- Ružinská E.: *Proc. 2nd Int. Symp.- Furniture 2002*, Technical University Zvolen, 2002.
- Berger W., Fischer P.: *Textiltechn.* 35, 6 (1985).
- Tokita N.: *Rubber Chem. Techn.* 50 (1977).
- Favis B. D., Califoux J. P.: *Polym.* 29 (1988).
- Chin H. B., Chan C. D.: *J. Rheology* 13 (1979).
- Lunden B., Schmel F.: *J. Coat. Fabr.* 14 (1984).
- Lipatov J. S., Nesterov A. E., Ignatova T. D.: *Vysokomol. sojed.* 3 (1982).

5L-15

SKLA SYSTÉMU $\text{Ga}_2\text{O}_3 - \text{PbO} - \text{P}_2\text{O}_5$

JIŘÍ SCHWARZ a HELENA TICHÁ

*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
jiri.schwarz@upce.cz*

Fosfátová skla jsou známa svými unikátními termickými a optickými vlastnostmi^{1,2}. Nižší chemická odolnost fosfátových skel se odstraňuje použitím vhodných modifikátorů (Bi_2O_3 , Fe_2O_3 , PbO , BaO), jejichž nevýhodou bývá posunutí krátkovlnné absorpční hrany do vyšších vlnových délek. Oxid gallitů vyniká vysokou stabilizací skloviny a zároveň nemá tak veliký vliv na oblast optické propustnosti skel^{3,4}. Proto je vhodným kandidátem na substituci s oxidem olovnatým za účelem zvýšení optické propustnosti směrem k ultrafialové

oblasti spektra a zároveň zachování stability skla.

V rámci studia systému $\text{Ga}_2\text{O}_3 - \text{PbO} - \text{P}_2\text{O}_5$ bylo připraveno a studováno celkem 29 vzorků v sedmi řadách (0; 10; 20; 30; 40; 50 a 60 mol.% P_2O_5). Syntéza byla provedena přímou tavbou v platinových a korundových kelímcích. Teplota syntéz se pohybovala v rozmezí 970–1440 °C v závislosti na chemickém složení. Získané vzorky vykazují skelný až krystalický stav. Připravené materiály byly charakterizovány hustotou (3,4–8,2 g cm⁻³), molárním objemem (26,5–48,5 cm³ mol⁻¹), termickými vlastnostmi (teplotou skelné transformace: 206–535 °C; deformační teplotou: 361–672 °C; koeficientem teplotní roztažnosti: 5–16 ppm/°C) a optickými vlastnostmi (optická šířka zakázaného pásu: 4–5 eV; index lomu: 1,7–2,1; Ramanova a infračervená spektroskopie).

Ze získaných výsledků byla stanovena oblast sklotvornosti studovaného systému. Kompoziční závislosti jednotlivých veličin ukazují na modifikační působení oxidu gallitého a olovnatého ve skle. Ramanova i infračervená spektra prokázala fragmentaci fosfátové sítě. S poklesem koncentrace P_2O_5 pozorujeme vstup Ga_2O_3 do strukturní sítě ve formě GaO_4 jednotek.

Studium systému $\text{Ga}_2\text{O}_3 - \text{PbO} - \text{P}_2\text{O}_5$ nám potvrdilo stabilizační funkci Ga_2O_3 , při relativně malém posunu optické propustnosti k vyšším vlnovým délkám v porovnání s běžně užívanými modifikátory. Relativně velká oblast sklotvornosti, nám umožňuje u tohoto systému připravit skelné materiály v relativně široké oblasti materiálových vlastností (koeficient teplotní roztažnosti, index lomu, optická propustnost).

Tato práce vznikla za podpory grantu GA38P199 a MSM0021627501.

LITERATURA

1. Wilder J. A.: J. Non-Cryst. Solids 879, 38/39 (1980).
2. Weber M. J.: J. Non-Cryst. Solids 208, 123 (1990).
3. Dumbaugh W. H., Tyndell B. P.: U.S. Pat. No. 4 456 692, June 26 (1984).
4. Dumbaugh W. H., Tyndell B. P.: U.S. Pat. No. 4 483 931, Nov. 20 (1984).

5L-16

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE POLYIMIDOVÝCH PĚN

PETR SYSEL^{a*}, JAKUB HRIB^a, MARIE FRYČOVÁ^b a EVGENIA MINKO^a

^a Ústav polymerů, ^b Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6 Petr.Sysel@vscht.cz

Polyimidy jsou polymery, které vykazují celkovou odolnost v širokém teplotním intervalu, přibližně od –150 do 200 °C. Jsou využívány nejčastěji v podobě tenkých vrstev (filmů, vláken), zejména v (mikro)elektronice, leteckém průmyslu a jako membrány¹. Ve všech uvedených oblastech má své opodstatnění uvažovat vedle tradičního využití v podobě neporézních materiálů i (potenciální) aplikace ve formě (nano)pěn. Pěnu lze získat napěněním pomocí činidla přítomného nebo přidaného do reakční směsi (plynu, nížeovroucí

kapaliny), nanopěny pak zejména dodatečným kontrolovaným odstraněním labilního podílu z blokového kopolymeru obsahujícího části lišící se svou termickou stabilitou. Poměrně značným problémem však zůstává příprava pěnových polyimidů s definovanou strukturou, především požadovanou relací mezi zastoupením otevřených a uzavřených pórů. V této práci byl sledován vliv reakčních podmínek, zejména chemického složení polyimidu a teplotně-časového režimu napěňování, na konečný charakter produktu připraveného postupem, při kterém byl jako napěňovací činidlo použit tetrahydrofuran².

Ve směsném rozpouštědle methanol/tetrahydrofuran byly připraveny polyimidové prekurzory, polyamidkarboxylové kyseliny, na bázi 4,4'-oxydifthalanhydridu nebo 3,3',4,4'-benzofenontetrakarboxyldianhydridu a 4,4'-oxydianilinu nebo 3,4'-oxydianilinu. Po cílené úpravě zastoupení pevného podílu ve směsi bylo za zvýšené teploty generováno napěnění a poté při 230 °C dokončena transformace polyamidkarboxylové kyseliny na polyimid. Úplnost transformace byla monitorována IČ spektroskopii. Objemová hmotnost pěn (od 0,04 g cm⁻³ pro některé produkty na bázi 3,3',4,4'-benzofenontetrakarboxyldianhydridu až po 0,12 g cm⁻³ na bázi 4,4'-oxydifthalanhydridu) korelovala se zastoupením uzavřených pórů (přibližně 10–35 %). Žádný z připravených produktů nevykazoval výraznější hmotnostní úbytek při teplotách do 300 °C (termogravimetrická analýza, gradient 10 °C min⁻¹, atmosféra dusíku). Pěny odolávají velmi dobře běžným rozpouštědlům (např. hexanu, acetonu) a zároveň v nich (včetně vody) vykazují nasákavost až stovky procent.

Tato práce vznikla za podpory projektu MSM 6046137302 a GA ČR 104/09/1357. Autoři též děkují RNDr. Z. Pientkovi, CSc. z Ústavu makromolekulární chemie AV ČR v.v.i., Praha za pomoc při stanovení zastoupení uzavřených pórů v pěnách metodou plynové pyknometrie.

LITERATURA

1. Hergenrother P. M.: High Perform. Polym. 15, 3 (2003).
2. Cano C. I., Weiser E. S., Kyu T., Pipes R. B.: Polymer 46, 9296 (2005).

5L-17

HODNOCENÍ MECHANICKÉ ODOLNOSTI PIGMENTOVANÝCH NÁTĚRŮ V DEFINOVANÉM DEFORMAČNÍM POLI

EVA SCHMIDOVÁ^a, PAVEL ŠVANDA^a, DAVID VESELÝ^b a ANDREA KALEDOVÁ^b

^a Katedra dopravních prostředků, Dopravní fakulta Jana Pernera, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, ^b Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice eva.schmidova@upce.cz

Předmětem prezentované práce je návrh a ověření nové metodiky testování mechanické odolnosti a přilnavosti pigmentovaných alkydových pryskyřic. Cílem bylo navrhnout metodiku zkoušení, která by umožnila kvantitativní hodnoce-

ni stability nátěrů při přesně definovaných podmínkách zatěžování. Standardně aplikované testy vnášejí do zatěžovaného materiálu i nátěru komplexní prostorovou napjatost a zároveň nerovnoměrný vliv tření na rozhraní identor-nátěr. Tato kombinace prakticky zneumožňuje korektní identifikaci působících složek zatížení a tedy vyhodnocení mechanické odolnosti nátěrů. To motivovalo výzkum chování nátěru v závislosti na daném napětově-deformačním stavu podkladového materiálu. Provedené studium metodicky vycházelo z mechanických zkoušek při jednoosém zatěžování vzorků s nátěrem v různých koncentracích antikoročních pigmentů. Tvar a rozměry vzorků umožnily vyhodnocení lokálních změn deformačního přetvoření při rozdílu 1-osé vs. 2-osé napjatosti, případně plastické anizotropii pokladové oceli. Měření deformace povrchu bylo provedeno pomocí optického systému Aramis 4M, kt. umožňuje prostřednictvím dvou kamer vyhodnotit 3D deformace formou deformačních map. Mapy byly následně konfrontovány s vyvolaným poškozením nátěrů, tj. vytvořen záznam deformace vs. poškození. V současné době jsou obdobné systémy používány pro hodnocení napětových stavů materiálů bez povlaku¹. Uvažovaná metodika hodnocení otevírá rovněž možnosti studia vlivu fundamentálních mechanismů, probíhajících v podkladovém materiálu. Jako jeden z podstatných efektů lze hodnotit vlivy spojené s masivní produkcí a pohybem dislokací v základním materiálu směrem k rozhraní s aplikovaným nátěrem. Kumulace dislokací na volném povrchu vzorků tvoří na rozhraní s nátěrem specifický reliéf, a to zejména v etapě dosažení plastické nestability vzorku. Výsledky vstupní série experimentů ukázaly vypovídací schopnosti optického systému hodnocení, konkrétně pro stanovení mezní deformace do porušení soudržnosti nátěru. Z analýz rovněž vyplynuly možnosti hodnocení v kombinaci s korozním zatěžováním nátěrů.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR č. 1M0519.

LITERATURA

1. Geiger M., Merklein M.: CIRP Ann. 52, 213 (2003).

5L-18 TECHNOLOGIE INKJET TISKU NA KATEDŘE POLYGRAFIE A FOTOFYZIKY

MIROSLAV TEJKL

*Katedra polygrafie a fotofyziky, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
mirek.miroslav@gmail.com*

Oblasti využití inkjet technologie sahají daleko za hranice grafického tisku, pro který byla původně vyvinuta. Svě uplatnění si nachází i v produkční výrobě, kde je třeba nanášet tenké vrstvy kapaliny nebo vytvářet obrazce s velkou prostorovou i objemovou přesností. Materiálový a technologický vývoj činí tuto technologii levnější a dostupnější. Pro úspěšnou aplikaci této technologie je důležité rozumět jejím principům a omezením, ze kterých vyplývají požadavky na vlastnosti tiskového inkoustu či kapaliny. Neméně důležité jsou vlastnosti související s interakcí s tiskovým substrátem.

Studiem této problematiky se zabýváme na KPF již několik let. Cíle dosažené za poslední 4 roky budou představeny v tomto příspěvku. Problematika přípravy pigmentových preparací pro vodu ředitelné i UV zářením tvrditelné akrylátové inkousty byla řešena ve spolupráci s firmou Synthesia. Pigmentové preparace byly připraveny mletím za mokra pomocí skleněné balotiny v laboratorním mlýnu značky Dynomill. Problematika formulace inkoustů byla řešena za využití metod plánování experimentu, které umožnily sledovat vliv jednotlivých složek inkoustu na jeho vlastnosti. Podařilo se naformulovat CMYK sadu vodu ředitelných inkoustů, azurový UV zářením tvrditelný radikálově polymerující akrylátový inkoust a průhledný UV zářením tvrditelný kationtově polymerující tiskový lak. Další studie se zabývaly interakcí inkoustu s tiskovým substrátem, kdy byly pozorovány tvary tiskových bodů v souvislosti s různými vlastnostmi potiskovaných materiálů. Většina tiskových testů byla realizována na KPF pomocí upravené stolní tiskárny Epson pro vodu ředitelné inkousty a na nátiskovém zařízení vlastní konstrukce vybaveným průmyslovou tiskovou hlavou Xaar pro nevodné a UV zářením tvrditelné inkousty. Perspektivní aplikaci představuje využití této technologie pro přípravu tenkých vodičových polymerních vrstev.

5L-19 ACRYLIC MONOMERS EMITTED BY COATING FILMS OF WATER BORNE LACQUERS AND PAINTS

**DANIELA TESAŘOVÁ, PETR ČECH, and ALENA
ANSORGOVÁ**

*Mendel University of Brno, Zemědělská 1, 613 00 Brno
tesar@mendelu.cz*

This paper investigates the problematic of VOC emissions especially the part of acrylate emitted by water borne coating films and water borne paints and lacquers during finishing wood based materials by them. There were monitored emissions of acrylates such as wood and wood based materials and their behavior in time. Different types of wooden based materials, particle board and medium density fiberboard have been chosen as tested samples for comparing in view of emitted acrylates by coating materials. The new method for measuring of emitted acrylates for testing by GC-MS was developed. The results of measuring were evaluated quantitatively and qualitatively. Quantitative difference of all emitted organic compound showed the measured values of TVOC. Repeating of measurements showed the dependency of amount of emissions on time. The results of testing residual acrylic monomers in finish coating films and substrate are investigated in this article too. All results were compared with limits mandated in the standard of Ministry of Health of the Czech Republic.

5L-20 CHALKOGENIDOVÁ SKLA – MATERIÁLY PRO FOTONIKU

MIROSLAV VLČEK

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

miroslav.vlcek@upce.cz

Chalkogenidová skla je velice široká skupina anorganických materiálů, kterou lze označit jako analogy oxidových skel, ve kterých je atom kyslíku nahrazen některým z těžších prvků 16. skupiny periodické tabulky prvků. Jejich elektropozitivnějším partnerem v základní skelné matici pak jsou zpravidla prvky 14. a 15. skupiny periodické tabulky prvků (typickými jsou As nebo Ge), případně je složení modifikováno i dalšími atomy (např. Cu, Zn, Ag). Velká variabilita ve složení chalkogenidových skel dává možnost připravit binární, ternární i multikomponentní amorfni materiály se zcela specifickými vlastnostmi potřebnými pro konkrétní aplikaci.

V předkládané práci jsou shrnuty výsledky našeho studia vlastností tenkých vrstev chalkogenidů As a Ge a možností jejich modifikace s ohledem na možné využití těchto materiálů v oblasti fotoniky ve viditelné i infračervené části spektra. Je zde věnována pozornost studiu vlivu složení vrstev a podmínek expozice na fotocitlivost vrstev (vrstvy expozicí vhodným zářením mění významně svůj index lomu a optickou šířku zakázaného pásu), na fotoindukované změny chemické reaktivity (vrstvy lze po lokální expozici selektivně leptat a přenášet tak obraz předlohy do těchto vrstev, případně jich využít jako fotorezistů s vysokým rozlišením pro přenos obrazu předlohy do podložky). Speciální pozornost je věnována i možnostem přímé korugace povrchu intenzivním laserovým paprskem. Tato metoda umožňuje tvorbu 3D struktur submikronových motivů bez jakékoliv doplňkové operace.

V práci je věnována pozornost i možné rozlišovací schopnosti při tvorbě mikro- a nanostruktur ve vrstvách chalkogenidů různými technikami. Je ukázáno, že vzhledem k amorfni charakteru vrstev a jejich citlivosti i na expozici svazkem elektronů lze v těchto vrstvách vytvářet skutečné nanostruktury (šířka motivů desítky nanometrů). Možnost tvorby takto jemných motivů v chalkogenidových sklech, které se vyznačují obecně vysokou hodnotou indexu lomu (2 až 3,2), vysokou hodnotou nelineárního indexu lomu (až 500× vyšší než SiO₂), transparentností v IČ oblasti (až do 10–20 μm dle volby chalkogenu), je předurčuje pro tvorbu celé řady fotonických prvků.

V závěru práce jsou proto uvedeny konkrétní příklady současných i potenciálních aplikací chalkogenidových skel ve fotonice.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 0021627501.

5L-21 VRSTEVNATÉ ORGANOFOSFONÁTY KOVŮ: NOVÉ PERSPEKTIVNÍ ANORGANICKO-ORGANICKÉ HYBRIDNÍ MATERIÁLY

VÍTĚZSLAV ZIMA^{a,*}, JAN SVOBODA^a, KLÁRA MELÁNOVÁ^a, LUDVÍK BENEŠ^b, MIROSLAVA TRCHOVÁ^c a JIŘÍ BRUS^c

^a Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského náměstí 2, 162 06 Praha 6 – Břevnov, současná adresa: Společná laboratoř chemie pevných látek, ÚMCh AV ČR, v.v.i. a Univerzity Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice,

^b Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ^c Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského náměstí 2, 162 06 Praha 6 – Břevnov

vitezslav.zima@upce.cz

Byla připravena a charakterizována řada nových dosud nepopsaných fenylfosfonátů a karboxyfenylfosfonátů kovů alkalických zemin a přechodných kovů. U tří karboxyfenylfosfonátů alkalických kovů s obecným vzorcem Me(HOOC₆H₄PO₃) (Me = Ca, Sr, Ba) byla určena jejich struktura z práškových rentgenových difraktogramů pomocí ab initio programu FOX. Hydrotermální syntézou byl připraven karboxyfenylfosfonát mědi, Cu(HOOC₆H₄PO₃), a z dat monokrystalové difrakce určena jeho struktura. Anorganická část této struktury je prvním případem sloučeniny mědi, v němž je uspořádání atomů kovu a atomů kyslíku analogické gibbsitickému dioktaedrálnímu uspořádání známému z některých typů jilu. Všechny uvedené sloučeniny se obecně skládají z anorganických vrstev, z nichž do mezivrstevného prostoru vyčnívá organická část.

Nově připravené fenylfosfonáty kovů s obecným vzorcem MeC₆H₅PO₃ · y H₂O (Me = Ca, Sr, Ba) se ukázaly být vhodnými hostitelskými materiály pro interkalaci reakce. Konkrétně se podařilo do těchto materiálů interkalovat homologickou řadu alifatických aminů a v některých případech i alkoholy. Dalším vhodným hostitelským materiálem je dosud nepopsaný methylfosfonát stroncia, jehož anorganická část je strukturně analogická fenylfosfonátu stroncia SrC₆H₅PO₃ · 2 H₂O. Tento materiál je schopen tvořit interkalaci sloučeniny s aminy, alkoholy a některými polymerními látkami.

Ze skupiny funkcionalizovaných fosfonátů kovů, patří mezi nejzajímavější látky obsahující sulfonylovou skupinu vázanou na benzenové v para poloze vůči fosfonové skupině. Tak bylo připraveno a charakterizováno několik nových 4-sulfofenylfosfonátů čtyřmocných kovů s obecným vzorcem Me(RPO₃)_x(HO₃SC₆H₄PO₃)_{2-x} · y H₂O (Me = Zr, Ce, Ti; R = C₆H₅, CH₃, OH; x = 0–1; y = 0–3). Díky silně kyselým sulfonové skupině v para poloze benzenového jádra jsou tyto sloučeniny schopny tvořit velmi stabilní interkaláty s látkami obsahujícími bazické funkční skupiny, zvláště s aminoskupinou, nebo mohou sloužit jako iontoměnič. Pomocí impedanční spektroskopie byla u těchto látek zjištěna zvýšená protonová vodivost.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203/08/0208.