

Témata studentských fakultních grantů

KMF

podzim 2023

Nanomateriály, polymery a makromolekuly – od přípravy a charakterizace až po aplikace

Experimentální práce:

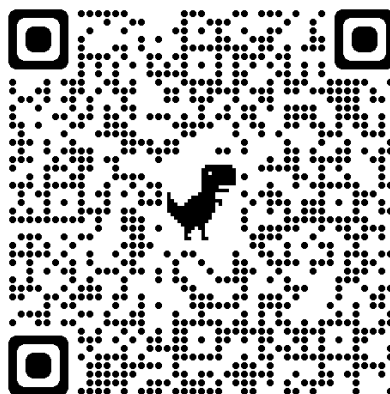
- Charakterizace nanočástic připravovaných pomocí plynového agregačního zdroje založeného na magnetronovém naprašování
- Příprava a studium dvousložkových nanomateriálů
- Studium elektrické vodivosti nanočásticových vrstev
- Vliv strukturních parametrů na kolaps v hydrogelech
- Výzkum organických polovodičů s využitím fluktuací proudu
- Dynamické procesy v oxoporfyrinogenech

Teorie/modelování/analýza dat:

- Chemická kinetika: určení řídicích rovnic z experimentálních dat
- Modely růstu agregátů
- Efekt rohatky v Knudsenově plynu
- Vliv zpětnovazebního zpoždění na dynamiku aktivních částic
- Termodynamické relace neurčitosti
- Modelování vzniku polymerních sítí při stereolitografickém 3D tisku hydrogelů
- Modelování struktury polymerních sítí vystavěných z prekurzorů
- Metoda konečných prvků – modelování vztahu napětí a deformace v bobtnajících gelech s omezeními

Prosím, berte tuto nabídku jen jako jakousi ochutnávku možných témat!

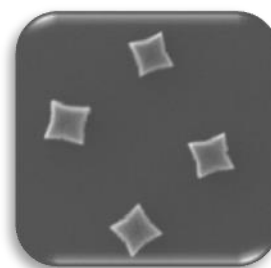
V případě vašeho zájmu rádi vypíšeme další témata *Studentských Fakultních Grantů*. V tomto případě nás neváhejte kontaktovat a to buď osobně, či e-mailem na adrese kmf@kmf.troja.mff.cuni.cz



Charakterizace nanočástic připravovaných pomocí plynového agregačního zdroje založeného na magnetronovém naprašování

Jednou z možností fyzikální přípravy nanočástic představují plynové agregační zdroje, které jsou vyvíjeny na naší katedře. Na rozdíl od jiných technik tyto zdroje umožňují přípravu velmi čistých nanočástic i jejich nanášení na jakýkoliv substrát kompatibilní s vysoko-vakuovými podmínkami (např. kovy, polymery, textil, biomolekuly ...). Nicméně vztah mezi depozičními podmínkami a výslednou strukturou produkovaných nanočástic zůstává stále předmětem intenzivního výzkumu.

*Vanadové nanočástice
připravené plynovým
agregačním zdrojem*



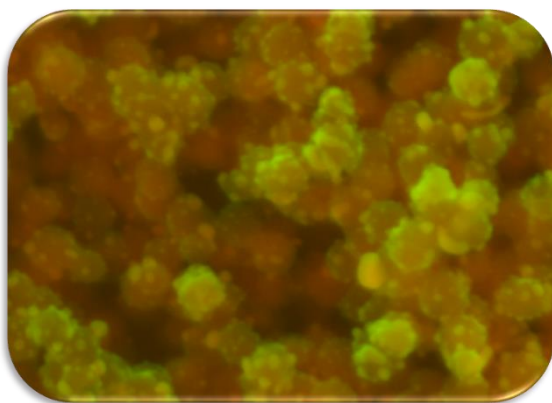
100 nm

Cílem tohoto studentského projektu proto bude detailně prozkoumat pro jeden vybraný druh materiálu použitého pro přípravu nanočástic vliv depozičních podmínek na jejich výsledné fyzikálně-chemické vlastnosti (např. velikost, chemická struktura, optické či elektrické vlastnosti, teplotní stabilita...). Typ produkovaných nanočástic i jejich hlavní charakteristika studovaná v rámci tohoto projektu budou blíže specifikovány po vzájemné domluvě i s ohledem na probíhající výzkumné projekty na KMF.

Práce má experimentální charakter.

Kontakt: doc. Ondřej Kylián, e-mail: ondrej.kylian@gmail.com

Příprava a studium dvousložkových nanomateriálů



*TiO₂ nanočástice dekorované
nanočásticemi stříbra*

Heterogenní porézní nanomateriály představují slibnou možnost, jak nejen výrazně zlepšit funkční vlastnosti připravovaných nanomateriálů, ale i vhodnou volbou jednotlivých složek získat pokročilé multifunkční materiály. Jednou z možností přípravy dvousložkových materiálů je současné využití více nanočásticových zdrojů, popřípadě kombinace nanočásticového zdroje s další vakuovou depoziční technikou (např. magnetronovým naprašováním). Tento postup přípravy dvousložkových nanomateriálů je však i přes slibné výsledky nedostatečně prozkoumán a je tudíž stále předmětem intenzivního výzkumu.

Cílem tohoto studentského projektu bude připravit jeden vybraný typ dvousložkové nanočásticové vrstvy a provést

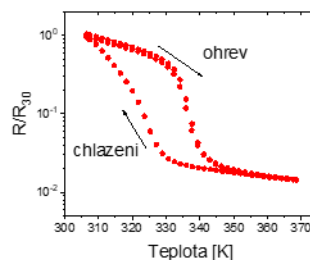
jeho detailní charakterizaci s ohledem na jeho morfologii, strukturu a optické vlastnosti. Konkrétní typ nanomateriálu studovaného v rámci tohoto projektu bude konkretizován po vzájemné domluvě i s ohledem na probíhající výzkumné projekty na KMF.

Práce má experimentální charakter.

Kontakt: doc. Ondřej Kylián, e-mail: ondrej.kylian@gmail.com

Studium elektrické vodivosti nanočásticových vrstev

Nanočásticové vrstvy představují skupinu materiálů s velkým aplikačním potenciálem, který je dán jejich unikátními vlastnostmi. Mezi ně patří bezesporu i elektrická vodivost. Tu je možné ladit nejen chemickou strukturou jednotlivých nanočástic či jejich množstvím, ale i architekturou nanočásticových vrstev. V neposlední řadě elektrická vodivost některých nanočásticových vrstev silně závisí i na okolních podmínkách jako jsou například teplota, či složení okolní atmosféry. Tohoto je možné využít pro vývoj nových typů senzorů, či elementů elektrických obvodů schopných definovaně reagovat na okolní stimuly.



Změna elektrické vodivosti VO_2 nanočástic s teplotou

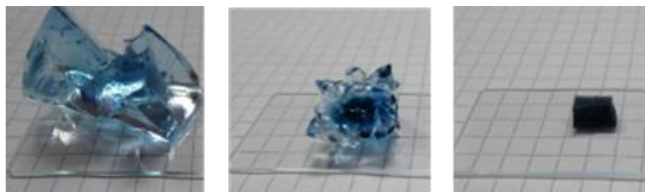
Cílem tohoto projektu bude detailně studovat závislost elektrické vodivosti různých typů tenkých nanočásticových vrstev na vnějších stimulech pomocí čtyřbodové Van der Pauwovy metody. V rámci projektu se student seznámí nejen s metodami používanými pro analýzu vodivosti nanočásticových vrstev, ale bude mít i možnost podílet se na jejich přípravě pomocí plazmových depozičních technik. Konkrétní typ studovaných nanočástic bude stanoven po vzájemné konzultaci se studenty.

Práce má experimentální charakter.

Kontakt: RNDr. Jan Prokeš, CSc., e-mail: jan.prokes@mff.cuni.cz

Vliv strukturních parametrů na kolaps v hydrogelech

Hydrogely jsou měkké polymerní materiály obsahující značné množství vody. Některé z nich mohou s malou změnou teploty nebo jiného vnějšího stimulu opakovaně změnit svůj objem až o 2 řády. Tyto responzivní hydrogely jsou zajímavé pro své uplatnění v biotechnologii a lékařství. Mohou být využity pro řízené uvolňování léčiv, sloužit jako biokatalyzátory, opravovat poškozené chrupavky a uplatňují se i v optice (kontaktní čočky). Při změně teploty dochází ke skokové změně objemu a rozpouštědlo (voda) je vypuzeno ze struktury hydrogelu, tuto změnu nazýváme fázovým přechodem, kolapsem. Při kolapsu dochází nejen ke změně objemu, ale tento jev ovlivňuje i jiné fyzikální vlastnosti hydrogelu.



Kolaps v hydrogelech

Vzhledem k širokému aplikačnímu potenciálu responzivních hydrogelů je důležité umět „ladit“ parametry kolapsu, jako např. kritickou teplotu, při které hydrogel začíná kolabovat. Parametry kolapsu lze ovlivnit při přípravě hydrogelů volbou monomeru nebo tím, jak hustě hydrogel sesítujeme. Další možností, jak ovlivnit vlastnosti a chování hydrogelů, je složení rozpouštědla.

Cílem tohoto projektu je určit vliv strukturních parametrů vybraných hydrogelů na jejich kolaps. Kromě makroskopických metod detekce kolapsu budeme jev zkoumat i z mikroskopického pohledu spektroskopii nukleární magnetické rezonance.

Práce má experimentální charakter.

Kontakt: doc. Lenka Hanyková, e-mail: lenka.hanykova@mff.cuni.cz

Výzkum organických polovodičů s využitím fluktuací proudu

Stejnoseměrný proud při průchodu polovodičem vykazuje fluktuace. Tento rušivý efekt, který je způsobený interakcí proudu s poruchami v polovodiči, byl vysvětlen po prvé na našem pracovišti - Katedře makromolekulární fyziky, kde byl vytvořen jeho model. Zvláštností tohoto jevu je, že v určitém oboru frekvencí jeho amplituda narůstá lineárně s převrácenou hodnotou frekvence. Navíc jsme ukázali, že je toho možno využít pro vyhodnocení základního parametru detektorů záření a slunečních článků- součinu pohyblivosti a doby života nosičů proudu. Ve frekvenčním spektru fluktuací se rovněž zobrazují polohy a intenzita poruchových center.

Úkolem práce bude proměřit spektra fluktuací několika organických polovodičů a určit součin pohyblivosti a doby života nosičů proudu. Zjistit, jak spektra fluktuací ovlivní různé koncentrace dopantů předložených vzorků.

Práce má experimentální charakter.

Kontakt: doc. Jiří Toušek, e-mail: tousek@karlov.mff.cuni.cz

Dynamické procesy v oxoporfyrinogenech

Oxoporfyrinogeny jsou makrocyclické sloučeniny, které disponují vazebnými místy. Proto na sebe dokáží navázat organické molekuly, kyseliny nebo ionty, čehož lze využít k detekci těchto molekul v roztoku. V oxoporfyrinogenech s navázanou kyselinou také probíhají různé dynamické molekulární procesy (obr. A).

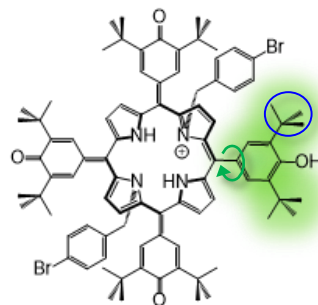
Tyto dynamické procesy lze studovat měřením nukleární magnetické rezonance (NMR spektroskopie). Jejich rychlost pak lze zjistit fitováním naměřených NMR spekter (obr. B). Tato metoda umožňuje studovat vliv teploty nebo koncentrace na dynamiku molekulárních systémů a zjišťovat tak o nich zajímavé detaily.

Cílem tohoto studentského projektu je prozkoumat vybrané dynamické vlastnosti některého derivátu oxoporfyrinogenu. Student se seznámí se spektroskopií NMR, která je jednou ze základních metod chemické fyziky a biofyziky, dále se zpracováním naměřených dat a jejich interpretací pomocí různých modelů.

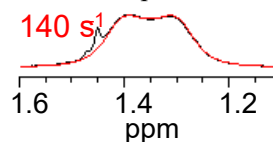
Práce může zahrnovat experimenty, jejich analýzu či vytváření modelů podle domluvy.

Kontakt: Václav Březina, Ph.D., e-mail: vaclav.brezina@matfyz.cuni.cz

obr. A dynamický oxoporfyrinogen



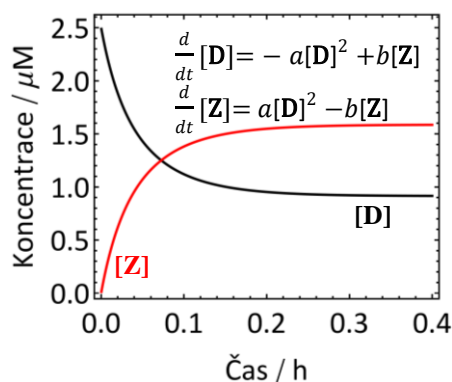
obr. B NMR spektrum



Chemická kinetika: určení řídicích rovnic z experimentálních dat

Chemická kinetika (tj. časový průběh chemických reakcí) je řízena soustavou diferenciálních rovnic. Zjištění těchto řídicích rovnic je důležité pro určení reakčního mechanismu. Existuje metoda zvaná Sparse Identification of Nonlinear Dynamics (SINDy), která umožňuje ze známých časových průběhů koncentrací reagujících látek právě tyto rovnice zjistit (koncentrace lze experimentálně zjistit pomocí různých spektroskopických měření). Tato metoda je založená na speciálním typu optimalizace, který hledá vhodné diferenciální rovnice s co nejmenším počtem členů. Metoda SINDy je relativně nová, na chemické systémy byla použita jen v několika málo studiích.

Cílem tohoto projektu je aplikovat metodu SINDy na simulované průběhy vybraných chemických reakcí a zjistit její citlivost na šum v datech. Student se seznámí s tvorbou modelů chemické kinetiky, simulací průběhu chemických reakcí a s použitím moderních optimalizačních nástrojů.



Práce bude zahrnovat převážně počítačové simulace a optimalizace.

Kontakt: Václav Březina, Ph.D., e-mail: vaclav.brezina@matfyz.cuni.cz

Modely růstu agregátů

Proces agregace, kdy se z monomerů stávají dimery, a pak delší a delší agregáty (viz **obr.**), se uplatní v mnoha různých oblastech. Roli monomeru může hrát například peptid β -amyloid, jehož agregáty tvoří amyloidní plak v mozku při Alzheimerově chorobě. Další typ monomerů jsou priony, jejichž agregace v mozku způsobuje nemoc šílených krav u dobytka či Creutzfeldovu-Jakobovu nemoc u lidí. Různé syntetické monomery se samy dokáží organizovat například do tzv. H- a J-agregátů, různých helikálních struktur, popřípadě jimi lze napodobovat chování přírodních prionů.

obr. ilustrace agregačního procesu



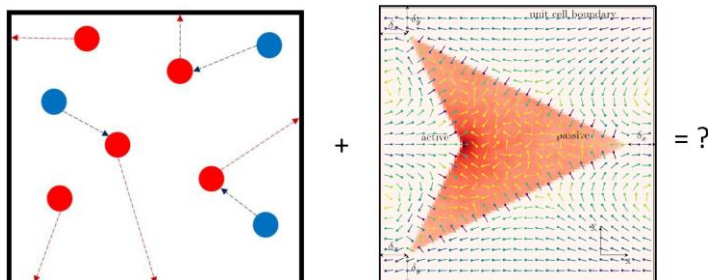
Agregační procesy lze modelovat pomocí rovnic chemické kinetiky, které musí mimo jiné zohlednit vznik nukleačních center, fragmentaci a existenci více agregačních drah.

Cílem tohoto projektu je prozkoumat existující poznatky o agregaci ve vědecké literatuře, zreprodukovat vybrané agregační modely na počítači a popsat možnosti jejich použití. Student se seznámí s tvorbou modelů chemické kinetiky a simulací agregačních procesů.

Práce bude zahrnovat studium vědecké literatury, analytické výpočty a počítačové simulace.

Kontakt: Václav Březina, Ph.D., e-mail: vaclav.brezina@matfyz.cuni.cz

Efekt rohatky v Knudsenově plynu



Jedním z důležitých mechanismů pohonu v mikrosvětě je mechanismus rohatky, který vhodnou kombinací efektů, jež sami osobě nemohou vyvolat usměrněným pohyb, tento pohyb vyvolává. Nové výsledky v teorii pohybu aktivních částic, jako jsou např. bakterie, ukazují, že lze rohatkový efekt vyvolat volbou vhodné rychlosti částic v závislosti na jejich poloze, což je

poněkud překvapivé, neboť směr pohybu těchto částic podléhá rotační difúzi, a tedy je v podstatě náhodný. Při měřeních prováděných s dostatečně malým časovým rozlišením je pohyb aktivních částic nerozlišitelný od difúze neaktivní hmoty v kapalině s prostorově závislou teplotou. Takový pohyb lze dobře teoreticky popsat s využitím předpokladu lokální rovnováhy a je o něm známo, že efekt rohatky sám o sobě vyvolat nemůže.

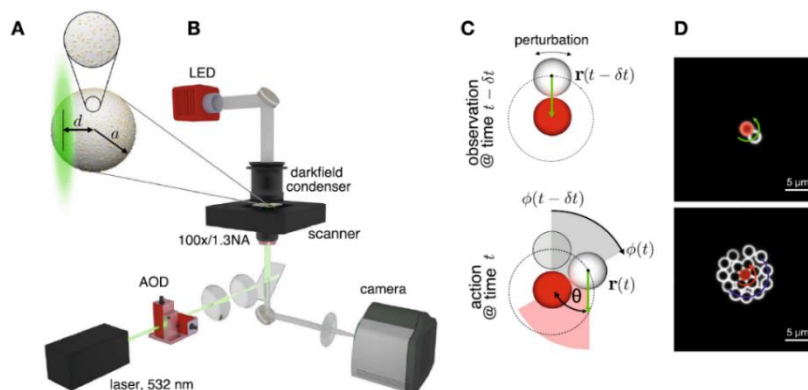
Cílem této práce je zjistit, zda v lze rohatkový efekt vyvolat v trubičce s periodicky se měnící teplotou stěn, již naplníme plynem dostatečně řídkým na to, aby se v něm nemohla ustanovit lokálně rovnovážná teplota (jedná se o tzv. Knudsenův plyn).

Práce má teoretický/numerický charakter.

Kontakt: dr. Viktor Holubec, e-mail: Viktor.Holubec@mff.cuni.cz

Vliv zpětnovazebního zpoždění na dynamiku aktivních částic

Náš výzkum v oblasti Brownovských částic řízených pomocí laseru ukazuje, že časová prodleva zpětnovazebního mechanismu, který rozhoduje na základně měření systému o zaměření laseru, hraje klíčovou roli ve výsledném chování systému. Např. částice tlačené laserem se zpožděním k fixnímu cíli začnou vlivem zpoždění kolem cíle rotovat.

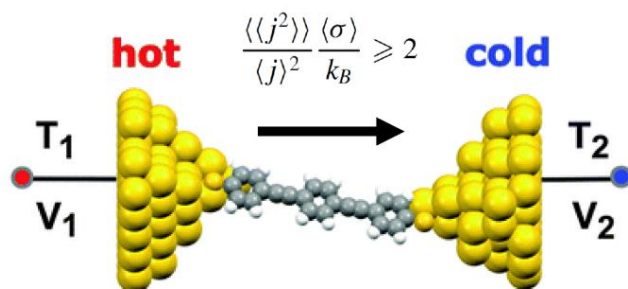


Cílem tohoto projektu je numericky zkoumat experimentálně relevantní systémy podobné jako ten na obrázku výše a hledat nové zajímavé efekty vyvolané zpožděním. Tím jednak dodáme inspiraci experimentátorům a přispějeme k lepšímu pochopení vlivu zpožděných interakcí v mikrosvětě.

Práce má teoretický/numerický charakter.

Kontakt: dr. Viktor Holubec, e-mail: Viktor.Holubec@mff.cuni.cz

Termodynamické relace neurčitosti



Jedním z největších objevů v oblasti nerovnovážné termodynamiky malých systémů jsou tzv. termodynamické relace neurčitosti, které stanovují minimální velikost fluktuací pro velkou množinu termodynamických toků. Spodní mez pro velikost fluktuací je v termodynamických relacích neurčitosti stanovena jako funkce střední hodnoty produkce entropie v systému, $\langle \sigma \rangle$. Tyto relace platí pro širokou škálu systémů, ne však obecně.

Cílem tohoto studentského projektu bude zkoumat systémy pro které existují pochyby o platnosti termodynamických relací neurčitosti. Konkrétně se zaměříme na režimy parametrů, kdy relace neplatí a pokusíme se stávající relace fenomenologicky zobecnit.

Práce má teoretický/numerický charakter.

Kontakt: dr. Viktor Holubec, e-mail: Viktor.Holubec@mff.cuni.cz

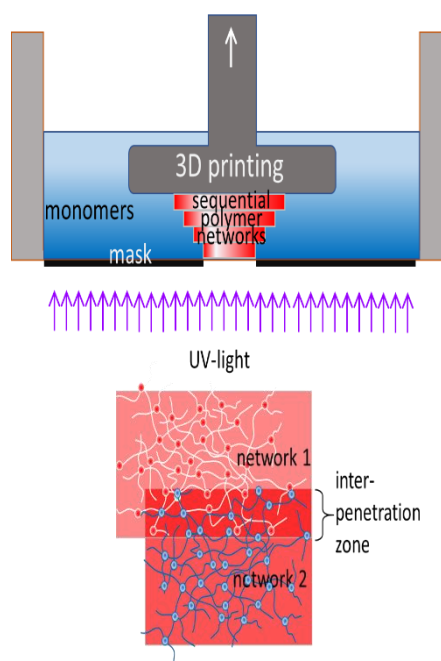
Modelování vzniku polymerních sítí při stereolitografickém 3D tisku hydrogelů

Základem tištěných polymerních materiálů je trojrozměrná molekulární síť vznikající fotopolymerizací reaktivních monomerů v tenké vrstvě požadovaného tvaru (promítaném skrze masku měnící se od vrstvy k vrstvě). Konečný výtisk je vystavěn z postupně přidávaných síťujících vrstviček. Pro výslednou soudržnost je určující propojení vrstev. To může být realizováno chemickým provázáním nebo vzájemnou penetrací následně tvořených sítí. Pro tento komplexní proces zatím není k dispozici fyzikální model (popisující vztah vznik-struktura-vlastnosti).

Cílem je vytvořit model tvorby polymerní sítě během tohoto komplexního procesu, a tím přispět k jeho pochopení. Student využije/modifikuje modely vytvořené na našem pracovišti založené na chemické kinetice a statistických metodách, případně využije i mocný nástroj založený na metodě konečných prvků – COMSOL Multiphysics® s Chemical Reaction Engineering Module pro lepší popis prostorové nehomogenity vrstevnaté sítě a termodynamických efektů. K dispozici je též stereolitografická 3D tiskárna a možnost experimentálního ověření.

Práce má teoretický charakter a bude využívat počítačové modelování.

Kontakt: Ján Šomvářsky, e-mail: jan.somvarsky@mff.cuni.cz



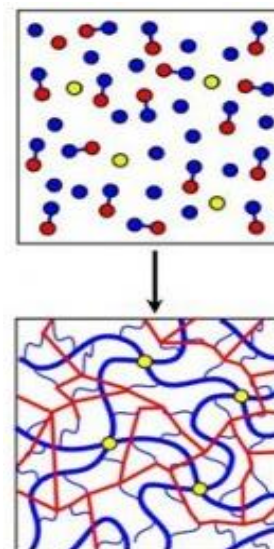
Modelování struktury polymerních sítí vystavěných z prekurzorů

V poslední době jsou čím dál víc žádané polymerní materiály vybudované z prekurzorů – z předem připravených molekul se specifickou strukturou a vlastnostmi – kvůli výrazně lepším možnostem dosáhnout požadované výsledné vlastnosti. Pražská škola a naše pracoviště je unikátní v teoretickém popisu a modelování vývoje struktury, zejména u složitějších systémů, jakými jsou sítě vystavěné z prekurzorů.

Cílem tohoto projektu bude vyladit a využít programy vytvořené na pracovišti, nebo vypracovat vlastní jednodušší program na výpočet nezákladnějších strukturních parametrů, zejména hustoty 3D sítě, která určuje makroskopické chování, např. mechanické vlastnosti.

Práce má teoretický charakter a bude využívat počítačové modelování.

Kontakt: Ján Šomvářsky, e-mail: jan.somvarsky@mff.cuni.cz



Metoda konečných prvků – modelování vztahu napětí a deformace v bobtnajících gelech s omezeními

Metoda konečných prvků (MKP) je numerická metoda na přibližné řešení parciálních diferenciálních rovnic (PDR) s okrajovými podmínkami. Na PDR vede popis velmi širokého spektra fyzikálních, chemických, biologických jevů, např. v materiálových vědách, fluidní dynamice, elektromagnetismu, astrofyzice, ekonomice, finančním modelování apod.

Cílem tohoto projektu bude obeznámit se s molekulárními modely kaučukovité elasticity, termodynamikou bobtnání, se základy metody konečných prvků a s mocným nástrojem založeným na této metodě – s programem COMSOL Multiphysics®. Student vytvoří jednoduchý model dvou spojených bloků nebo core-shell z dvou různých polymerů, a bude zkoumat chování při bobtnání a mechanickém zatížení.

Práce bude využívat počítačové modelování.

Kontakt: Ján Šomvářsky, e-mail: jan.somvarsky@mff.cuni.cz

