

Témata studentských fakultních grantů

KMF

jaro 2022

- Charakterizace nanočástic připravovaných pomocí plynového agregačního zdroje založeného na magnetronovém naprašování
- Příprava core-shell nanočástic s Ti jádrem pomocí plynového agregačního zdroje
- Opracování hladkých a strukturovaných povrchů pomocí iontového děla
- Počítačové modelování 2D či 3D růstu porézních nanočásticových vrstev
- Studium dynamiky vypařování kapek
- Vliv strukturních parametrů na kolaps v hydrogelech
- Studium hystereze elektrické vodivosti nanočásticových vrstev
- Opracování polysacharidů plazmatem za atmosférického tlaku pro zlepšení jejich rozpustnosti ve vodě
- Studium nanostrukturovaných povlaků na bázi nanočástic oxynitridů přechodných kovů
- Odporové přepínání ve stříbrných nanokapalinách pro neuromorfní aplikace
- Plazmové polymery: stavba molekulární struktury "bottom-up" nebo "top-down"?
- Nový plynový agregační zdroj nanočástic pro biolékařské aplikace
- Vazebné vlastnosti a dynamika oxoporfyrinogenů
- Metoda konečných prvků – modelování vztahu napětí a deformace v bobtnajících gelech s omezeními
- Modelování struktury polymerních sítí vystavěných z prekurzorů

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

V případě vašeho zájmu rádi vypíšeme další témata *Studentských Fakultních Grantů*.

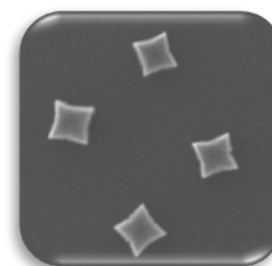
V tomto případě nás neváhejte kontaktovat a to buď osobně, či e-mailem na adrese

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*



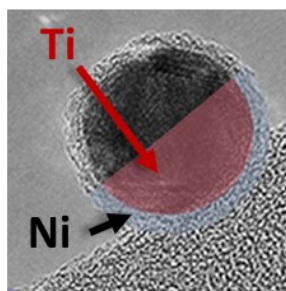
100 nm

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 core-shell nanočástic s Ti jádrem pomocí plynového agregačního zdroje



Ti/Ni nanočástice typu jádro/slupka

Bimetalické nanočástice jsou v dnešní době využívány v mnoha oborech lidské činnosti. Zároveň jsou vhodnými objekty pro studium interakcí dvou různých kovů na nanoměřítku. Jedním z možných způsobů přípravy takovýchto nanočástic je využít plynový agregační zdroj nanočástic (Gas Aggregation Source – GAS) a vzniklé nanočástice následně pokrýt pomocí magnetronového naprašování druhým kovem. Tímto způsobem lze připravit např. nanočástice typu jádro@slupka (core@shell), tedy nanočástice, kde jádro nanočástice (core) je z jednoho druhu materiálu, na něj je pak nanášen jiný typ materiálu – shell.

Cílem tohoto projektu bude příprava core@shell nanočástic z Ti a Ni, přičemž hlavní úsilí bude věnováno přípravě nanočástic s Ti jádrem a Ni slupkou. Připravené nanočástice budou následně studovány pomocí pokročilých analytických technik – struktura a chemické složení pomocí skenovací elektronové mikroskopie včetně prvkové analýzy (SEM a EDX). Na připravených nanočásticích bude v rámci projektu GAČR pokračovat detailní výzkum jejich chování pomocí transmisní elektronové mikroskopie v kombinaci s indentací.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí: doc. Jan Hanuš, e-mail: jan.hanus@gmail.com

Opracování hladkých a strukturovaných povrchů pomocí iontového děla



Nově instalované
iontové dělo

Jedněmi z důležitých vlastností tenkých vrstev jsou jejich tloušťka a morfologie povrchu. Zatímco u nestrukturovaných tenkých vrstev je možno tloušťku většinou snadno řídit při známé depoziční rychlosti pomocí doby deposice, morfologie samotného povrchu je dána mechanismem růstu tenké vrstvy. Pro některé aplikace je pak vhodné mít možnost jak tloušťku, tak morfologii připravené vrstvy jemně doladit. Jednou z možností je následné opracování povrchu pomocí plazmatu. Pokud je povrch bombardován vysokoenergetickými ionty např. Ar, dochází k jeho odprašování. Vhodným nastavením procesních parametrů lze docílit toho, že výsledný povrch je tzv. iontově vyleštěn. Iontové oprašování tak lze využít i k odstranění nežádoucích struktur na povrchu s komplexní morfologií. Jedním z příkladů takového povrchu jsou TiO_2 nanotrubičky vzniklé anodizací Ti vrstev.

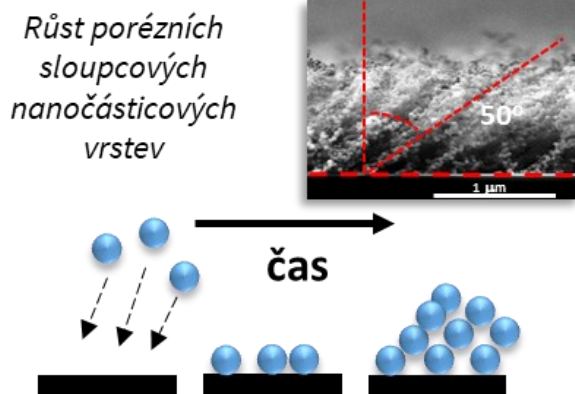
Cílem této práce bude otestovat možnosti vyhlazení povrchu TiO_2 nanotrubkové vrstvy a případná modifikace tloušťky stěn těchto nanotrubek. Vliv iontového odprašování na TiO_2 hladké a strukturované vrstvy bude zkoumán pomocí mikroskopie atomových sil (AFM), spektroskopické elipsometrie a skenovací elektronové mikroskopie (SEM). Výsledky získané v rámci tohoto projektu najdou uplatnění v běžícím projektu GAČR.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí: doc. Jan Hanuš, e-mail: jan.hanus@gmail.com

Počítačové modelování 2D či 3D růstu porézních nanočásticových vrstev

Na naší katedře se zbýváme kontrolovanou přípravou nanočásticových vrstev, které díky svým unikátním vlastnostem nacházejí uplatnění v celé řadě moderních aplikací. Jednou z výhod námi používané metody pro syntézu nanočásticových vrstev, která je založena na tzv. plynových agregačních zdrojích, je směrovost deposice. Ta umožňuje připravovat nejen vysoce porézní nanočásticové vrstvy, ale i vrstvy mající nanosloupcový charakter.



Cílem tohoto projektu bude navrhnout a realizovat 2D či 3D model růstu nanočásticových vrstev v závislosti na směru deposice i na velikosti a rozdělení velikostí nanočástic dopadajících na povrch substrátu. S pomocí navrženého modelu bude následně studována morfologie výsledných nanočásticových vrstev.

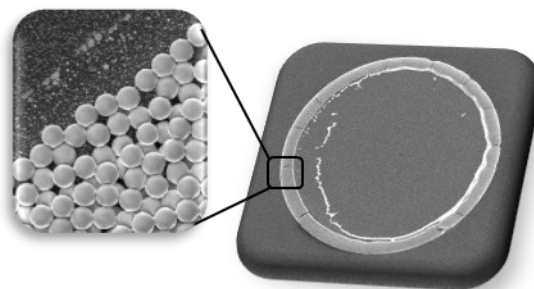
Práce bude využívat počítačové modelování.

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

Studium dynamiky vypařování kapek

Vypařování kapek ulpívajících na povrchu pevné látky je jev, který přes svou zdánlivou jednoduchost představuje jedno ze zajímavých a velice důležitých vědeckých témat, jemuž je v současné době v odborné komunitě věnována velká pozornost. Tento zájem je dán především možností pochopit a ovlivňovat dynamiku schnutí roztoků či suspenzí obsahujících různé biomolekuly, a tím kontrolovat i výsledný tvar „depozitu“ vzniklého po úplném vypaření kapaliny. Tvar „depozitu“ je zásadní nejen pro dynamicky se rozvíjející oblast 3D tisku, ale například i pro ultracitlivou biodetekci, kdy mechanismus zasychání kapek může vést k velmi účinné prostorové separaci biomolekul dle jejich velikosti.

Cílem tohoto studentského fakultního grantu bude na modelovém případě suspenze částic o přesně definované velikosti studovat vliv koncentrace částic v suspenzi i vliv povrchových vlastností substrátů (smáčivost, drsnost) na dynamiku schnutí.



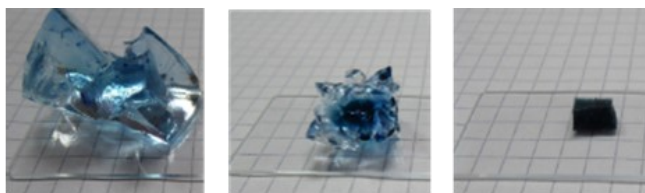
„Coffee-ring“ obrazec vzniklý po zaschnutí kapky obsahující SiO_2 částice

Práce má experimentální charakter.

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

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.

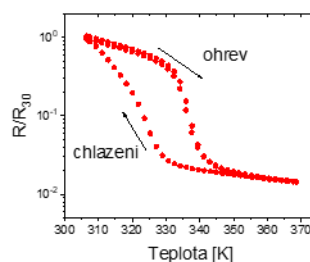
Cílem tohoto projektu je určit vliv strukturních parametrů vybraných hydrogelů na jejich kolaps. Kromě makroskopických metod detekce kolapsu budeme jev zkoumat i z mikroskopického pohledu spektroskopii nukleární magnetické rezonance.

Práce má experimentální charakter.

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

Studium hystereze 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.



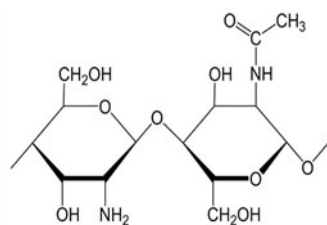
Změna elektrické vodivosti VO_2 nanočástic s teplotou

Cílem tohoto projektu bude detailně studovat závislost elektrické vodivosti různých typů kovových a oxidových 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.

Práce má experimentální charakter.

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

Opracování polysacharidů plazmatem za atmosférického tlaku pro zlepšení jejich rozpustnosti ve vodě



Polysacharid

Plazma



Polysacharidy jsou přírodní polymery s dlouhým řetězcem složené z monosacharidových jednotek vázaných dohromady glykosidickými vazbami. Škrob, celulóza a chitin jsou nejznámější polysacharidy. Existují však například chitosan a alginát sodný, které nejsou tak „slavné“, ale jsou široce používány ve farmacii, kosmetice a zemědělství kvůli jejich biokompatibilitě, netoxicitě a efektům podporujícím růst rostlin. Hlavním faktorem omezujícím jejich použití je jejich špatná rozpustnost ve vodě. Typicky je k rozpuštění chitosanu vyžadováno přidání malého

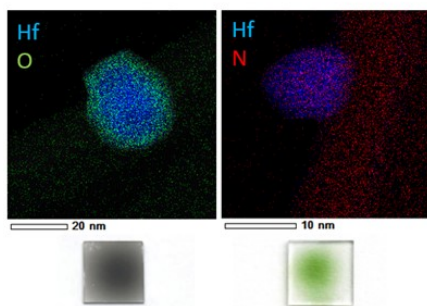
objemu nízko koncentrované kyseliny octové. Nedávno však bylo prokázáno, že opracování chitosanu plazmatem v roztoku může podporovat tvorbu frakcí rozpustných ve vodě. Tento jev se vysvětluje degradací polymerních řetězců působením aktivních látek bez chemické transformace chitosanu.

Cílem tohoto projektu je prozkoumat vliv opracování plazmovou tryskou za atmosférického tlaku na rozpustnost chitosanu a alginátu sodného ve vodě. Výboj bude provozován v radiofrekvenčním režimu v argonu a vzduchu. Chitosan a alginát sodný budou opracovávány za sucha a dispergovány v deionizované vodě. Vlastnosti polysacharidů po plazmatické modifikaci budou podrobně charakterizovány řadou metod dostupných na Katedře makromolekulární fyziky.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí: Dr. Daniil Nikitin, e-mail: daniil_nikitin@kmf.troja.mff.cuni.cz

Studium nanostrukturovaných povlaků na bázi nanočástic oxynitridů přechodných kovů



STEM chemical maps and photos of HfN NPs deposited onto SiO₂ substrates

Nanostrukturované povlaky na bázi nanočástic oxidů a nitridů přechodných kovů jsou velice důležité v mnoha aplikačních oblastech, jako jsou například foto-elektrochemický rozklad vody, senzory pro detekci různých plynů, napětově nezávislé paměti atd. Je zřejmé, že pro většinu těchto aplikací je nutné mít možnost ladit fyzikálně-chemické vlastnosti nanočástic, případně jejich optickou či elektrickou odezvu. Zároveň jsou takové nanomateriály vysoce citlivé na různé nečistoty způsobené použitím rozpouštědel či linkery během jejich přípravy. Proto na naší katedře využíváme fyzikální metody přípravy nanočástic kombinující nízkotlakovou syntézu nanočástic pomocí reaktivního magnetronového rozprašování kovových terčů s kondenzací na inertním plynu. Tato metoda umožňuje nejen tvorbu nanočástic s vysokou čistotou bez

použití rozpouštědel, ale poskytuje i možnost řídit nanoarchitekturu a optické/elektrické vlastnosti výsledných nanočástic.

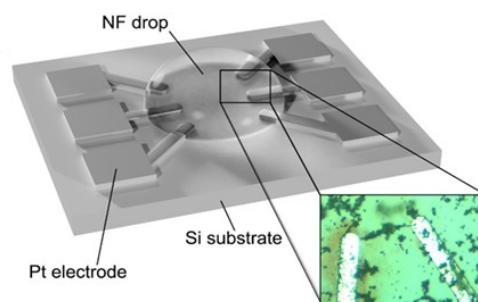
Cílem tohoto studentského projektu bude příprava nanostrukturovaných povlaků na bázi nanočástic oxynitridů přechodných kovů (Hf, Ta atd.) s laditelnou optoelektronickou odezvou. Pozornost bude věnována studiu vlivu depozičních a plazmatických parametrů na fyzikálně-chemické vlastnosti produkovaných nanočástic (morfologie, struktura, chemické složení, optické a elektrické vlastnosti atd.). Plánováno je i zhodnocení účinnosti nanočásticových povlaků z hlediska jejich funkčnosti s ohledem na možné využití pro katalýzu či plynové senzory.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí: Mgr. Pavel Pleskunov, PhD, e-mail: pleskunov@kmf.troja.mff.cuni.cz

Odporové přepínání ve stříbrných nanokapalinách pro neuromorfni aplikace

Neuromorfni inženýrství je rychle se rozvíjející odvětví vědy zaměřené na vývoj nanopřístrojů, které napodobují procesy probíhající v mozku. Tato zařízení jsou schopna zpracovávat informace extrémně vysokou rychlostí s nízkou spotřebou energie. Úspěšně byla vyvinuta celá řada neuromorfni systémů, například umělé neurony a synapse založené na memristorech. Jejich koncepce je založena na periodickém vytváření a ničení vodivých kanálů mezi dvěma elektrodami, tzv. odporový spínací efekt. Nedávno bylo prokázáno, že sítě nanočástic mohou být slibnou alternativou ke konvenčním memristorům na bázi tenkých vrstev. Tradičně se však realizují v pevném stavu. Nedávno bylo zjištěno, že kovové nanokapaliny (koloidní roztoky kovových nanočástic) lze považovat za memristory v kapalném stavu.



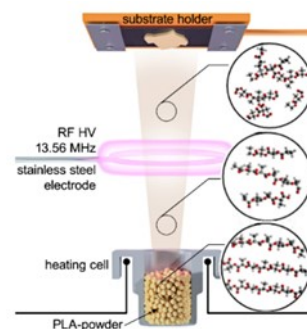
Cílem tohoto projektu je prozkoumat odporové spínací efekty v nanokapalinách stříbro/polymer. Nanokapaliny budou připravovány pomocí depozice nanočástic z plynového agregačního zdroje do kapalného polymeru ve vakuu. Bude studován vliv koncentrace nanočástic, střední velikosti, distribuce velikostí a vlastností hostitelské kapaliny na odporové spínání.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí: Dr. Daniil Nikitin, e-mail: daniil_nikitin@kmf.troja.mff.cuni.cz

Plazmové polymery: stavba molekulární struktury "bottom-up" nebo "top-down"?

Klasické polymery jsou chemicky dobře definované, s omezením na maximální praktickou míru sesíťování. Pro tzv. plazmové polymery je naopak vysoká míra sesíťování typická, za cenu velké nepravidelnosti chemické struktury. Plazmatem asistovaná vakuová termální depozice tenkých vrstev kombinuje výhody obou přístupů. Díky tomu může ke tvorbě molekulární struktury látky využít princip "top-down" (z oligomerů, velkých "stavebních bloků") i "bottom-up" ((re)syntézu z malých molekulárních fragmentů) a plynule mezi těmito přístupy přecházet. Zejména v této přechodové oblasti je důležitá stabilita depozičních podmínek.

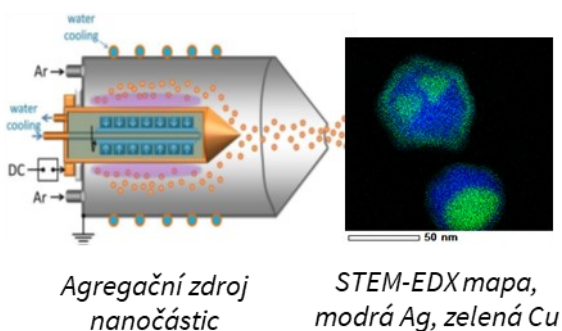


Cílem tohoto projektu bude nejprve nalezení vhodných parametrů pro dosažení kontinuální depozice zejména za malých výkonů v plazmatu. V této oblasti bude následně (zejména studiem složení připravených vrstev) charakterizována dynamika přechodu od fragmentace k polymeraci. Výsledky získané v rámci tohoto projektu najdou uplatnění v běžícím projektu GAČR.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí: Dr. Jaroslav Kousal, e-mail: jarda@kmf.troja.mff.cuni.cz

Nový plynový agregační zdroj nanočástic pro biolékařské aplikace



Plynové agregační zdroje nanočástic se vyvíjejí na naší katedře i na jiných pracovištích ve světě už delší dobu, ale jejich praktické uplatnění ztroskotává na reprodukovatelnosti a malé produkci nanočástic. Významný pokrok představuje plynový agregační zdroj s tubulárním (tyčovým) magnetronem. V současné verzi se v Cu těle katody nachází magnetický obvod z permanentních magnetů, který rotuje a vytváří magnetické pole ve tvaru nutném pro magnetronový mód. Studují se parametry plazmatu stejnosměrného magnetronového výboje, vliv tlaku (cca 100 Pa) a

proudění pracovního plynu Ar, proudu (cca 400 V) a napětí (cca 1A) na výboji na vznik Cu nanočástic. Tyto se nanášejí na podložku ve vzorkové komoře za výstupním otvorem agregačního zdroje. Vložením trubicových segmentů z Ag plechu na Cu katodu se vytváří kompozitní terč Cu-Ag pro přípravu heterogenních nanočástic Ag/Cu (např. core@shell, Janus atd), které se studují pomocí elektronové mikroskopie, zejména SEM a TEM a i jinými technikami a dále se evaluují jejich antibakteriální vlastnosti.

Cílem práce je prozkoumat vliv příkonu do magnetronu (proud a napětí na výboji), vliv tlaku a proudu Ar na generaci nanočástic za různých magnetických polí (různých magnetických obvodů) a různé konfigurace kompozitního terče (magnetronu). První experimenty s přípravou nanočástic Zr, jeho oxidů a nitridů.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí: Prof. Hynek Biederman, e-mail: bieder@kmf.troja.mff.cuni.cz

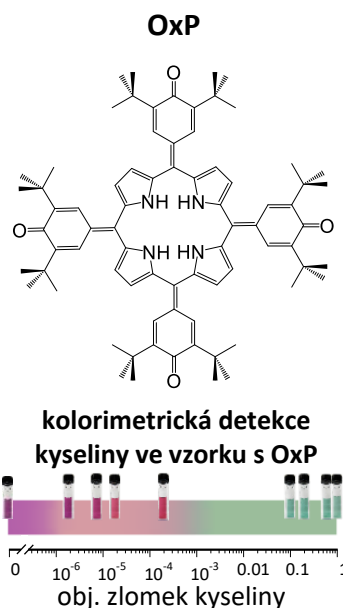
Vazebné vlastnosti a dynamika oxoporfyrinogenů

Oxoporfyrinogen (**OxP**) a jeho deriváty na sebe dokáží navázat organické molekuly, kyseliny nebo ionty. Tyto interakce vedou ke změně barvy oxoporfyrinů, proto mohou sloužit jako kolorimetrické molekulární senzory detekující s velkou citlivostí přítomnost dalších látek v roztoku. Tyto vazebné vlastnosti studujeme měřením absorpce světla (UV-vis spektroskopie) nebo nukleární magnetické rezonance (NMR spektroskopie). V systémech **OxP**+kyselina probíhá mnoho intermolekulárních i intramolekulárních dynamických procesů, které lze studovat pomocí speciálních NMR technik. Kvantitativní popis vazebných i dynamických procesů vyžaduje vytváření modelů kompatibilních s naměřenými daty.

Cílem tohoto studentského projektu je prozkoumat vybrané vazebné či dynamické vlastnosti některého derivátu oxoporfyrinogenu. Student se seznámí se základními spektroskopickými metodami chemické fyziky a biofyziky a způsobem popisu molekulárních interakcí.

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

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



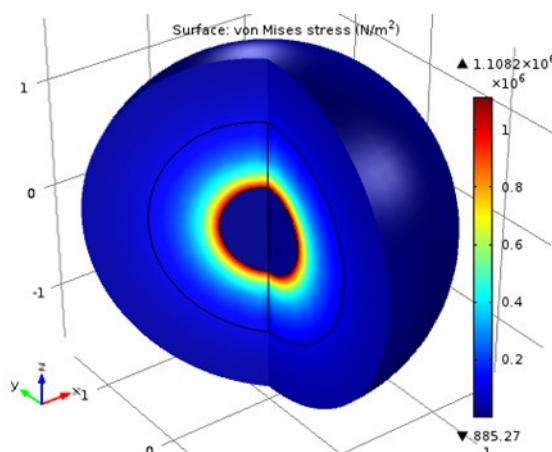
Metoda konečných prvků – modelování vztahu napětí a deformace v bobtnajících gelech s omezeními

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



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 jediného, a to nejzákladnějšího parametru – koncentrace elasticky aktivních řetězců – a srovnat výsledky s uvážením a bez uvážení vlastní struktury prekurzoru.

Práce má teoretický charakter a bude využívat počítačové modelování.

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

