

Témata studentských fakultních grantů

KMF

jaro 2024

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 nanočástic oxidů přechodových kovů pomocí plynového agregačního zdroje
- Studium elektrické vodivosti nanočásticových vrstev
- Odporové přepínání v kovových nanokapalinách pro neuromorfni aplikace
- Vliv strukturních parametrů na kolaps v hydrogelech
- Dynamické procesy v oxoporfyrinogenech

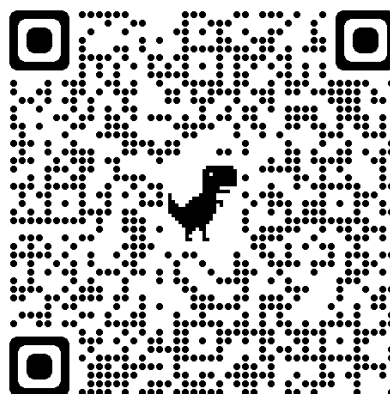
Teorie/modelování/analýza dat:

- Modely růstu agregátů
- Analýza UV/vis spekter pomocí singulárního rozkladu
- Vliv zpětnovazebního zpoždění na dynamiku aktivních částic
- Termodynamické relace neurčitosti
- Fázové přechody v nerovnovázných biologických systémech

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

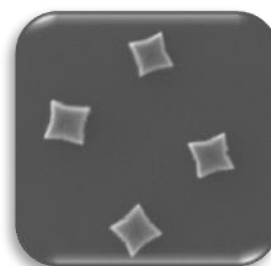
V případě vašeho zájmu rádi vypíšeme další témata *Studentských Fakultních Grantů*. V tomto případě nás neváhejte kontaktovat a to buď osobně, či e-mailem na adrese

kmf@kmf.troja.mff.cuni.cz



Charakterizace nanočástic připravovaných pomocí plynového agregačního zdroje založeného na magnetronovém naprašování

Jednu 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.



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@matfyz.cuni.cz

Příprava nanočástic oxidů přechodových kovů pomocí plynového agregačního zdroje

Plynový agregační zdroj nanočástic je zařízení, ve kterém dochází k syntéze nanočástic díky kondenzaci přesycených kovových par na inertním pracovním plynu. Jedná se o tzv. bottom-up fyzikální metodu přípravy nanočástic. Kov je uváděn do plynného stavu pomocí magnetronového naprašování v agregační komoře, kde protéká pracovní plyn. Za tlaků desítek Pa zde dochází k tvorbě nanočástic o velikostech kolem 10-30 nm. Tyto nanočástice jsou unášeny proudem pracovního plynu a skrz výstupní štěrbinu jsou dále vyfouknuty do depoziční komory, kde jsou deponovány na podložku. Pokud pracovní plyn obsahuje reaktivní příměs jako kyslík, lze tímto způsobem připravovat i oxidové nanočástice. Díky přítomnosti kyslíku však dochází k tvorbě oxidové vrstvy i přímo na povrchu terče, což snižuje depoziční rychlost nanočástic a celkovou stabilitu systému. Jednou z možností, jak tento nežádoucí jev překonat, je využití tzv. full face erozion (FFE) magnetronu, kdy je materiál terče průběžně odprašován z celé plochy terče. Výsledný oxidační stav nanočástic, jejich velikost a morfologii lze navíc ovlivnit přidavným radiofrekvenčním (RF) výbojem v agregační komoře.



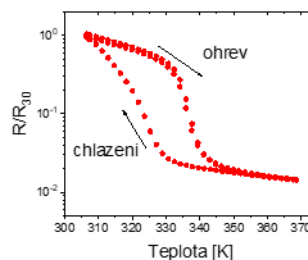
Cílem tohoto projektu bude výzkum a optimalizace procesu přípravy nanočástic oxidů přechodových kovů pomocí plynového agregačního zdroje vybaveného FFE magnetronem přidavnou RF elektrodou. Bude zkoumán vliv procesních parametrů na tvorbu a strukturu nanočástic. Práce je součástí řešení grantového projektu GAČR.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí: doc. Mgr. Jan Hanuš, Ph.D. e-mail: jan.hanus@matfyz.cuni.cz

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

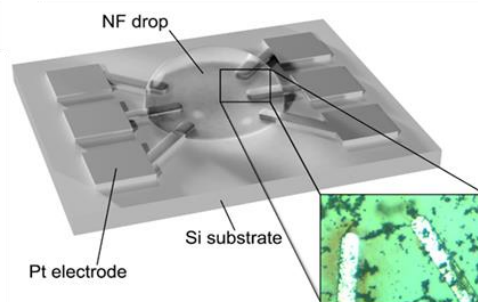
Cílem tohoto projektu bude detailně studovat závislost elektrické vodivosti různých typů tenkých nanočásticových vrstev na vnějších stimulech pomocí čtyřbodové Van der Pauwovy metody. V rámci projektu se student seznámí nejen s metodami používanými pro analýzu vodivosti nanočásticových vrstev, ale bude 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: doc. Ondřej Kylián, e-mail: ondrej.kylian@matfyz.cuni.cz

Odporové přepínání v kovových 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.



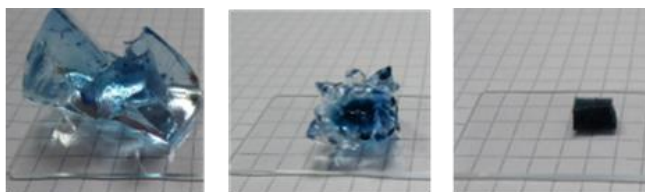
Cílem tohoto projektu je prozkoumat odporové spínací efekty v nanokapalinách kov/polymer. Nanokapaliny budou připravovány pomocí depozice nanočástic z plynového agregačního zdroje do kapalného polymeru ve vakuu. Bude studován vliv koncentrace nanočástic, střední velikosti, distribuce velikostí a vlastností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

Práce má experimentální charakter.

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

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 možnosti, 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

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).

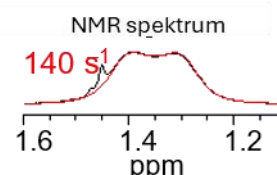
Tyto dynamické procesy lze studovat měřením nukleární magnetické rezonance (spektroskopie NMR). Jejich rychlost pak lze zjistit fitováním naměřených spekter NMR (obr. B). Tato metoda umožňuje studovat vliv teploty nebo koncentrace na dynamiku molekulárních systémů a zjišťovat tak o nich zajímavé detaily.

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 bude zahrnovat experimenty na spektrometru NMR a zpracování naměřených dat.

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

Dynamický proces v oxoporfyrinogenu



Analýza UV/vis spekter pomocí singulárního rozkladu

Schopnost látek absorbovat světlo lze měřit pomocí UV/vis spektroskopie (ultraviolet/visible). Nejčastějším typem měření je tzv. titrace, kdy se do vzorku s jedním reaktantem R_1 přidává druhý reaktant R_2 a sleduje se tvoření produktu $P_1 \dots P_N$, pro každou koncentraci R_2 je změřeno UV/vis spektrum.

Naměřená titrační spektra jsou tedy lineární kombinací spekter všech reaktantů a produktů přítomných ve vzorku. Nabízí se otázka, jak zjistit počet různých produktů, jejich koncentrace a spektra (ne všechny přítomné látky je možné změřit izolovaně). K tomu slouží tzv. *singulární rozklad* matice A , jejíž sloupce jsou naměřená titrační spektra (viz **obr.**). Matice vzniklé z rozkladu A , čili U , S a V , dokáží odlišit signál od šumu (viz barevné, resp. šedé složky na obr.) a poskytnou tím informaci o počtu absorbujících složek ve vzorku.

Sloupce U a V , které obsahují signál, lze lineární transformací převést na spektra jednotlivých absorbujících složek (tj. reaktantů a produktů). K tomu je obecně zapotřebí reakční model, který nemusí být známý. Existuje však možnost zrekonstruovat spektra absorbujících složek a jejich koncentrace i bez použití reakčního modelu. Právě tento přístup bude hlavní náplní studentského projektu.

$$A = U S V^T$$

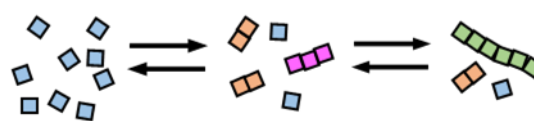
Cílem tohoto projektu je prozkoumat možnosti analýzy UV/vis spekter pomocí singulárního rozkladu bez použití reakčního modelu. Student se seznámí s analýzou UV/vis spekter, základy tvorby modelů chemických reakcí a s použitím singulárního rozkladu, který má široké možnosti využití i v jiných oblastech (např. ve statistice nebo ve strojovém učení).

Projekt bude zahrnovat především práci na počítači, popř. analytické výpočty.

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, helikálních struktur, popřípadě jimi lze napodobovat chování přírodních prionů.



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.

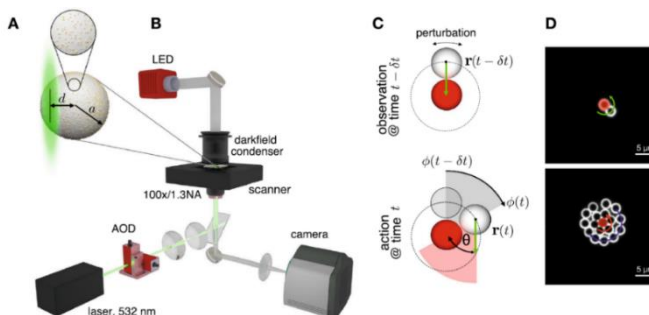
Cílem tohoto projektu je prozkoumat existující poznatky o agregaci ve vědecké literatuře, zreprodukovat vybrané agregační modely na počítači a popsat možnosti jejich použití. Student se seznámí s tvorbou modelů chemické kinetiky a simulací agregačních procesů.

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

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

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.

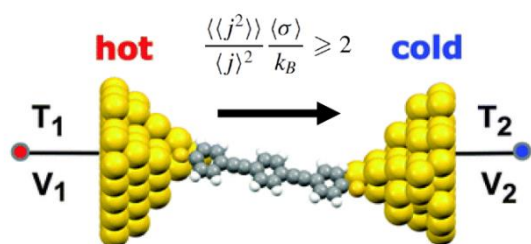


Cílem tohoto projektu je numericky zkoumat experimentálně relevantní systémy podobné jako ten na obrázku výše a hledat nové zajímavé efekty vyvolané zpožděním. Tím jednak dodáme inspiraci experimentátorům a přispějeme k lepšímu pochopení vlivu zpožděných interakcí v mikrosvětě.

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.

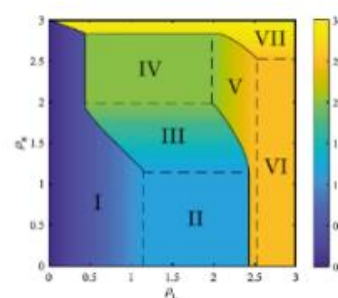
Cílem tohoto studentského projektu bude zkoumat systémy pro které existují pochyby o platnosti termodynamických relací neurčitosti. Konkrétně se zaměříme na režimy parametrů, kdy relace neplatí a pokusíme se stávající relace fenomenologicky zobecnit.

Práce má teoretický/numerický charakter.

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

Fázové přechody v nerovnovážných biologických systémech

Cílem této teoretické práce bude tvorba a studium modelů dynamiky komplexních biofyzikálních a chemických procesů, jako jsou např. transport skrze buněčné membrány, kinetika tvorby proteinů a nerovnovážný růst povrchů. Při analýze modelů se zaměříme zejména na studium dynamických fázových přechodů vznikajících díky kolektivnímu chování těchto nerovnovážných mnohačasticových systémů.



Práce má teoretický/numerický charakter.

Kontakt: RNDr. Artem Ryabov, Ph.D., e-mail: rjabov.a@gmail.com