

Témata studentských fakultních grantů

KMF

jaro 2023

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

Experimentální práce:

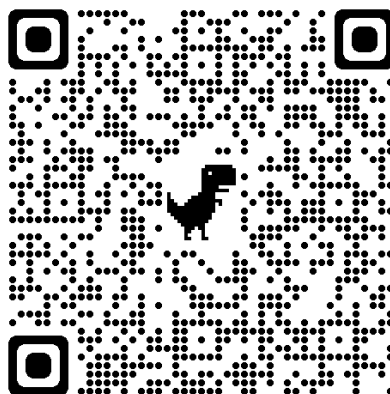
- Charakterizace nanočástic připravovaných pomocí plynového agregačního zdroje založeného na magnetronovém naprašování
- Vliv přídavného RF výboje na přípravu nanočástic pomocí plynového agregačního zdroje
- Opracování hladkých a strukturovaných povrchů pomocí iontového děla
- Příprava a studium dvousložkových nanomateriálů
- Studium hystereze elektrické vodivosti nanočásticových vrstev
- Studium dynamiky vypařování kapek
- Vliv strukturních parametrů na kolaps v hydrogelech
- Výzkum perovskitu - nového perspektivního materiálu pro sluneční články
- Plazmové polymery: stavba molekulární struktury "bottom-up" nebo "top-down"?

Teorie/modelování/analýza dat:

- Vazebné vlastnosti a dynamika oxoporfyrinogenů
- Chemická kinetika: určení řídicích rovnic z experimentálních dat
- 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 vystavených z prekursorů
- Metoda konečných prvků – modelování vztahu napětí a deformace v bobtnajících gelech s omezeními

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

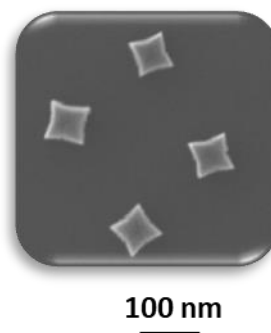
V případě vašeho zájmu rádi vypíšeme další témata *Studentských Fakultních Grantů*. V tomto případě nás neváhejte kontaktovat a to buď osobně, či e-mailem na adrese kmf@kmf.troja.mff.cuni.cz



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

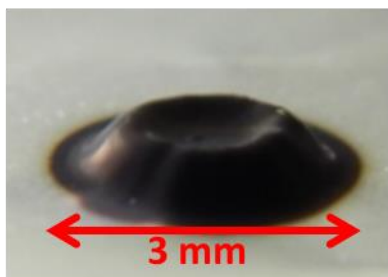


Cílem tohoto studentského projektu proto bude detailně prozkoumat pro jeden vybraný druh materiálu použitého pro přípravu nanočástic vliv depozičních podmínek na jejich výsledné fyzikálně-chemické vlastnosti (např. velikost, chemická struktura, optické či elektrické vlastnosti, teplotní stabilita...). 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

Vliv přídavného RF výboje na přípravu nanočástic pomocí plynového agregačního zdroje



„Hora“ Cu nanočástic

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 (Ar). Za tlaků desítek Pa zde dochází díky vzájemným srážkám atomů kovu a Ar k tvorbě nanočástic, které jsou nosným plynem vyfouknuty do depoziční komory, kde jsou deponovány na podložku. Navzdory již více než 3 dekadám trvajícímu výzkumu, se doteď nenašlo širší uplatnění mimo oblast základního výzkumu. Jedním z limitujících faktorů je relativně

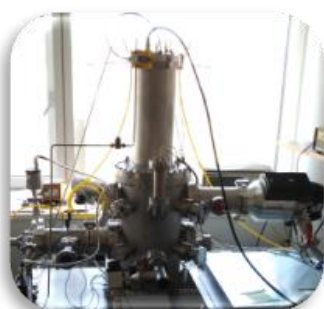
nízké procento materiálu, který je po odprášení využit na tvorbu nanočástic deponovaných na podložku. Valná většina materiálu, až 90 %, zůstane jako nežádoucí depozit na stěnách agregační komory.

Cílem tohoto projektu bude výzkum a optimalizace modifikovaného plynového agregačního zdroje. V agregační komoře bude vložena radiofrekvenční (RF) elektroda, která umožní zapálení přídavného výboje. Tento přídavný výboj ovlivňuje rozložení elektromagnetické pole v agregační komoře a zároveň nabíjení vznikajících nanočástic. Snahou bude nalézt takové podmínky, aby se minimalizovala nežádoucí depozice materiálu na stěny komory. Bude zkoumán vliv přídavného RF výboje na záchyt nanočástic v plazmatu a tím na jejich výslednou velikost. Nanočástice budou charakterizovány zejména pomocí skenovací elektronové mikroskopie.

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*

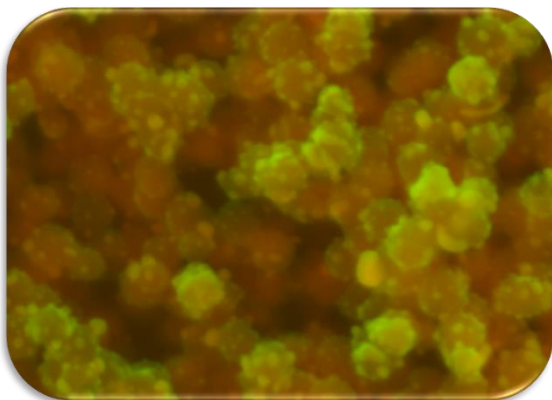
Jedněmi z důležitých vlastností tenkých vrstev jsou jejich tloušťka a morfologie povrchu. Zatímco u nestrukturovaných tenkých vrstev je možno tloušťku většinou snadno řídit při známé depoziční rychlosti pomocí doby depozice, morfologie samotného povrchu je dána mechanismem růstu tenké vrstvy. Pro některé 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 oprášování 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 nanotrubičkové vrstvy a případná modifikace tloušťky stěn těchto nanotrubiček. 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

Příprava a studium dvousložkových nanomateriálů



*TiO_2 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

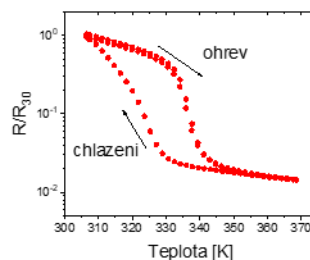
jeho detailní charakterizaci s ohledem na jeho morfologii, strukturu a optické vlastnosti. Konkrétní typ nanomateriálu studovaného v rámci tohoto projektu bude konkretizován po vzájemné domluvě i s ohledem na probíhající výzkumné projekty na KMF.

Práce má experimentální charakter.

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

Studium 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 VO₂ nanočástic s teplotou

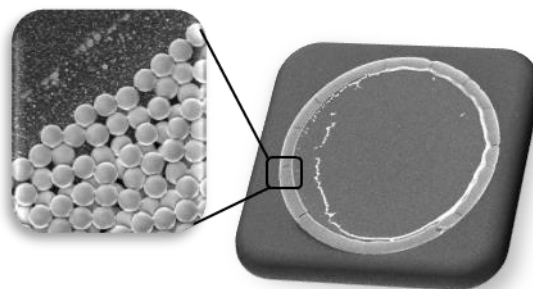
Cílem tohoto projektu bude detailně studovat závislost elektrické vodivosti různých typů kovových a oxidových tenkých nanočásticových vrstev na vnějších stimulech pomocí čtyřbodové Van der Pauwovy metody. V rámci projektu se student seznámí nejen s metodami používanými pro analýzu vodivosti nanočásticových 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

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.



„Coffee-ring“ obrazec vzniklý po zaschnutí kapky obsahující SiO₂ částice

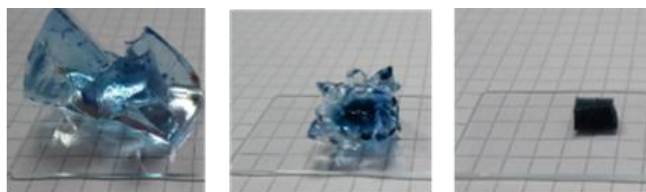
Cílem tohoto studentského fakultního grantu bude na modelovém případě suspenze částic o přesně definované velikosti studovat vliv koncentrace částic v suspenzi i vliv povrchových vlastností substrátů (smáčivost, drsnost) na dynamiku schnutí.

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 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

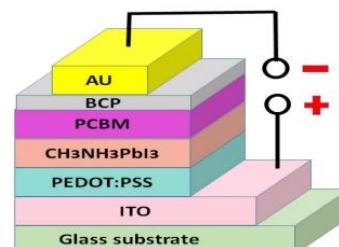
Výzkum perovskitu - nového perspektivního materiálu pro sluneční články

Přestože vývoj slunečních článků na bázi perovskitu (chemický vzorec je $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) trvá jen několik let, podařilo se již na něm dosáhnout účinnosti srovnatelné s účinností nejlepších slunečních křemíkových článků. Výhodou perovskitu je jednodušší a levnější technologie přípravy, protože pro články postačují vrstvy o tloušťce několika mikrometrů. Pro aplikace má význam časová stabilita a reprodukovatelnost vlastností, což vyžaduje diagnostiku parametrů vrstev. Jedním z nejdůležitějších parametrů je pohyblivost nosičů proudu. Ta se ale vzhledem k vysokému odporu a polarizovatelnosti vrstev měří obtížně. Na Katedře makromolekulární fyziky jsme postavili aparaturu, která je pro tato měření vhodná. Kromě toho jsme vyvinuli další metodu pro měření součinu pohyblivosti a doby života nosičů proudu, která využívá fluktuací proudu a která ve světě dosud není známá.

Cílem této práce bude proměřovat vrstvy perovskitu a sledovat jejich parametry v závislosti na čase, případně na způsobu přípravy.

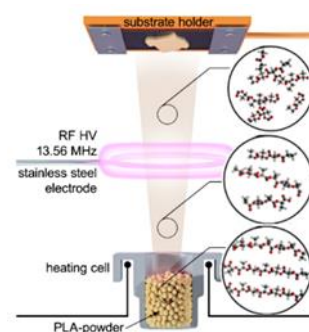
Práce má experimentální charakter.

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



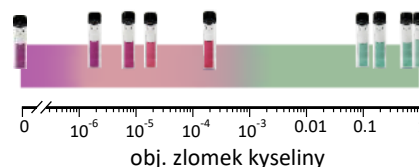
Cílem tohoto projektu bude nejprve nalezení vhodných parametrů pro dosažení kontinuální depozice zejména za malých výkonů v plazmatu. V této oblasti bude následně (zejména studiem složení připravených vrstev) charakterizována dynamika přechodu od fragmentace k polymeraci. Výsledky získané v rámci tohoto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

Práce má experimentální charakter.

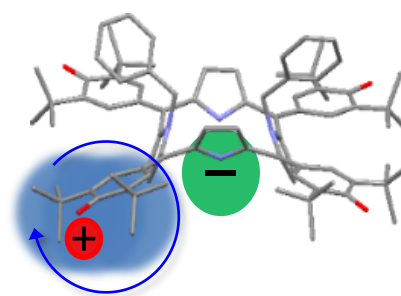
Vedoucí: Dr. Jaroslav Kousal, e-mail: jarda@kmf.troja.mff.cuni.cz

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 oxoporfyrinogenů, čehož lze využít například k detekci i nepatrného množství kyseliny v roztoku. V systémech **OxP** + kyselina také probíhají různé dynamické molekulární procesy.



Tyto molekulární systémy lze studovat měřením absorpce světla (UV-vis spektroskopie) nebo měřením nukleární magnetické rezonance (NMR spektroskopie). Interpretace naměřených dat pak vyžaduje vytvoření příslušného vazebného či dynamického modelu, kterým se konkrétní systém **OxP** + kyselina popíše.



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, zpracováním naměřených dat a jejich interpretací pomocí různých modelů.

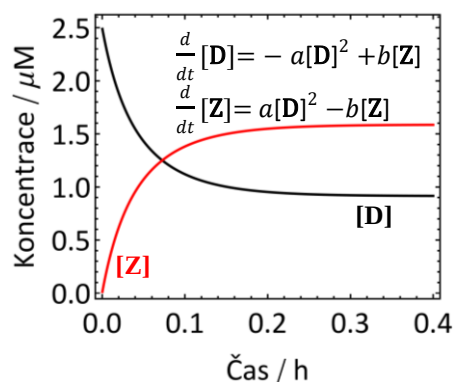
Práce může zahrnovat experimenty, jejich analýzu či vytváření modelů podle domluvy.

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

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.

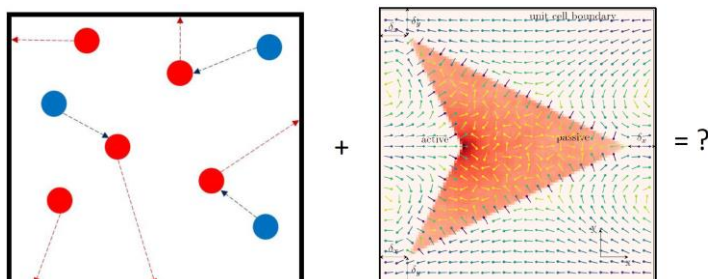
Cílem tohoto projektu je aplikovat metodu SINDy na simulované průběhy vybraných chemických reakcí a zjistit její citlivost na šum v datech. Student se seznámí s tvorbou modelů chemické kinetiky, simulací průběhu chemických reakcí a s použitím moderních optimalizačních nástrojů.



Práce bude zahrnovat převážně počítačové simulace a optimalizace.

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

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.

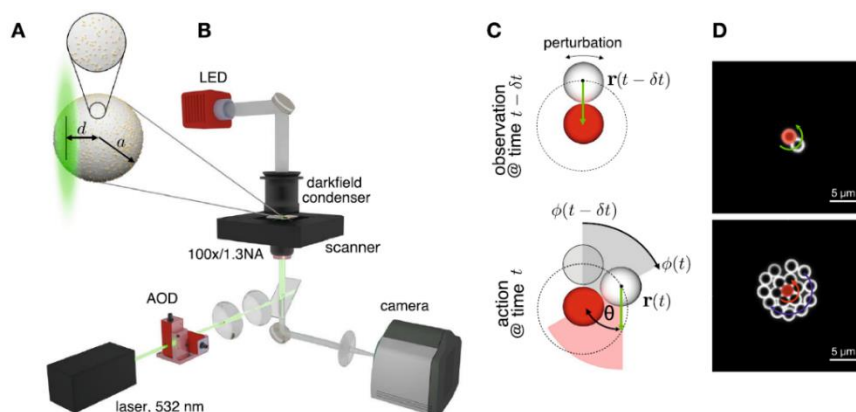
Cílem této práce je zjistit, zda v lze rohatkový efekt vyvolat v trubičce s periodicky se měnící teplotou stěn, již naplníme plynem dostatečně řídkým na to, aby se v něm nemohla ustanovit lokálně rovnovážná teplota (jedná se o tzv. Knudsenův plyn).

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 základě 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.

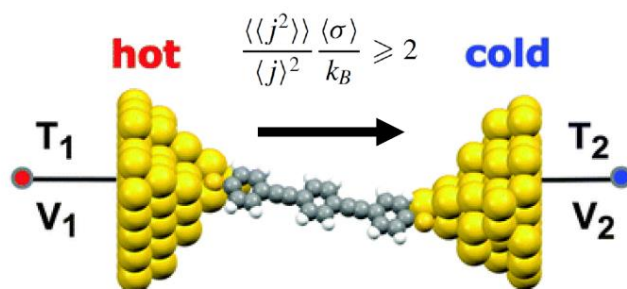


Cílem tohoto projektu je numericky zkoumat experimentálně relevantní systémy podobné jako ten na obrázku výše a hledat nové zajímavé efekty vyvolané zpožděním. Tím jednak dodáme inspiraci experimentátorům a přispějeme k lepšímu pochopení vlivu zpožděných interakcí v mikrosvětě.

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.

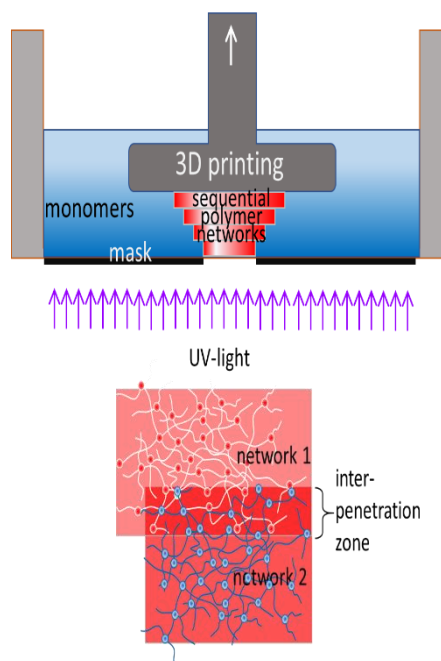
Cílem tohoto studentského projektu bude zkoumat systémy pro které existují pochyby o platnosti termodynamických relací neurčitosti. Konkrétně se zaměříme na režimy parametrů, kdy relace neplatí a pokusíme se stávající relace fenomenologicky zobecnit.

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 vystaven 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

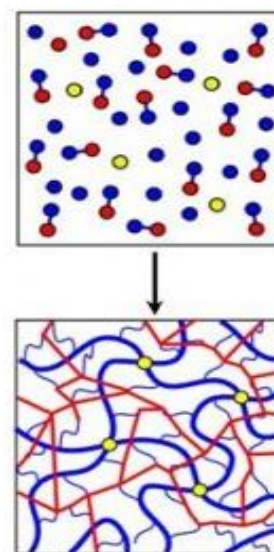
Modelování struktury polymerních sítí vystavěných z prekurzorů

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 nejzákladnějších 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

