

Témata studentských fakultních grantů

KMF - jaro 2025

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

Nanomateriály:

- Charakterizace nanočástic připravovaných pomocí plynového agregačního zdroje založeného na magnetronovém naprašování
- Vývoj a charakterizace nových zdrojů nanočástic
- Příprava a studium bimetalických nanokapalin se zajímavými optickými vlastnostmi
- Odporové přepínání v kovových nanokapalinách pro neuromorfní aplikace
- Příprava a studium dvousložkových nanomateriálů

Polymery a makromolekuly:

- Vliv strukturních parametrů na kolaps v hydrogelech
- Spektroskopické studium derivátů porfyrinů
- Analýza UV/vis spekter pomocí singulárního rozkladu
- Modely růstu agregátů
- Výpočet tvarů spekter s chemickou výměnou v NMR
- Změna smáčivosti reálných povrchů pro manipulaci vícefázovým prouděním v kosmické mikrogravitaci

Teorie/modelování/analýza dat:

- Vliv zpětnovazebního zpoždění na dynamiku aktivních částic
- Termodynamické relace neurčitosti
- Fázové přechody v nerovnovážných 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



Nanočástice a nanomateriály

Jednou z atraktivních možností fyzikální přípravy nanočástic představují plynové agregační zdroje, které jsou již po řadu let úspěšně vyvíjeny a používány na naší katedře. Na rozdíl od jiných technik tyto zdroje umožňují efektivní přípravu velmi čistých nanočástic bez nutnosti použití nejrůznějších potenciálně toxických rozpouštědel či linkerů, i jejich nanášení na jakýkoliv substrát kompatibilní s vysoko-vakuovými podmínkami (např. kovy, polymery, textil, biomolekuly, ale i různé kapaliny). V současné době na naší katedře probíhá v návaznosti na různé granty výzkum ve třech oblastech, ze kterých vycházejí i nabízené Studentské Fakultní Granty:

- **Výzkum zaměřený na pochopení vztahu mezi depozičními podmínkami a výslednou strukturou produkovaných nanočástic.** Předmětem těchto projektů je vždy pro jeden vybraný druh materiálu použitého pro přípravu nanočástic detailně prozkoumat vliv depozičních podmínek na jejich výsledné vlastnosti (např. velikost, tvar, chemickou strukturu, optické či elektrické vlastnosti, teplotní stabilitu...). Předmětem našeho zájmu jsou jak **nanočástice kovů** a jejich **oxidů či nitridů**, tak i **nanočástice s polymerům podobnou strukturou**.
- **Výzkum a vývoj nových konceptů plynových agregačních zdrojů pro efektivní a kontrolovanou syntézu nanočástic.** Příklady takovýchto projektů jsou projekt zaměřený na studium a charakterizaci nově vyvíjeného plynového agregačního zdroje s **cylindrickým magnetronem**, projekty zabývající se možností využití agregačních komor s **přídavnou RF elektrodou**, či vývojem nových zdrojů nanočástic na **termálním vypařování kombinovaným s plazmatem**.
- **Aplikačně orientovaný výzkum zaměřený na vývoj pokročilých nanomateriálů.** V rámci těchto projektů dochází například ke studiu **vícesložkových nanomateriálů** připravovaných pomocí plynových agregačních zdrojů pro citlivou (bio)detekci či detekci plynů, anebo vývoj opticky aktivních **nanokaplin** nebo **nanokapalin** pro **neuromorfní inženýrství**, tedy materiály napodobující procesy probíhající v mozku.

Fyzika polymerů a makromolekulárních látek

V oblasti *fyziky polymerů a makromolekulárních látek* je náš zájem zaměřen tradičně na výzkum polymerních sítí, hydrogelů, vodivých polymerů, supramolekulárních komplexů a organických polovodičů a plazmových polymerů. V současné době nabízíme studentům Studentské Fakultní Granty zaměřené například na:

- Studium kolapsu v hydrogelech
- Spektroskopické studium derivátů porfyrinů
- Studium růstu agregátů pomocí modelů reakční kinetiky
- Analýzu a modelování absorpčních spekter biomolekul
- Kontrola smáčivosti povrchů

Teoretická fyzika

V oboru teoretické fyziky se zabýváme vysoce perspektivními oblastmi nerovnovážné termodynamiky, statistickou fyzikou, či aktivní hmotou. V rámci Studentských Fakultních Grantů, které mají přímou návaznost na řešené grantové projekty, studentům nabízíme například projekty zaměřené na:

- studium **termodynamických relací neurčitosti**
- výzkum **fázových přechodů v biologických systémech**
- **dynamiku aktivních částic**
- **modelování růstu agregátů**

Vzhledem k velké šíři možných projektů studentům doporučujeme kontaktovat pracovníky naší katedry a prodiskutovat s nimi náplň SFG a jeho detaily.

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, elektrické či magnetické vlastnosti, teplotní stabilita...). **Typ produkovaných nanočástic (kov, oxid kovu, plazmový polymer) 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 a probíhá v návaznosti na běžící projekty GAČR.

Kontakt: doc. Ondřej Kylián, e-mail: ondrej.kylian@matfyz.cuni.cz

Vývoj a charakterizace nových zdrojů nanočástic

Ačkoliv plynové agregační zdroje jsou vyvíjeny a používány již od devadesátých let minulého století, jejich širšímu uplatnění brání zejména relativně nízké depoziční rychlosti, malé využití rozprašovaného terče či obtížnost regulovat velikost výsledných nanočástic. V rámci naší katedry se podílíme na vývoji nových typů plynových agregačních zdrojů, které by tyto nevýhody alespoň částečně odstranily. V rámci studentských projektů nabízíme možnost podílet se na těchto projektech:

- **Studium plynového agregačního zdroje na bázi cylindrického magnetronu.** Bude testována možnost využít tento zdroj k produkci nanočástic kovů a jejich nitridů.
Kontakt: Dr. Daniil Nikitin, e-mail: daniil_nikitin@kmf.troja.mff.cuni.cz
- **Příprava a studium depozice hybridních plazmově polymerních nanočástic.** V rámci tohoto projektu testován zdroj nanočástic založený na termálním vypařování kombinovaném s přidávným plazmatem.
Kontakt: doc. Pavel Solař, e-mail: pavel.solar@matfyz.cuni.cz
- **Příprava niklových nanočástic pomocí plynového agregačního zdroje.** V tomto případě bude použit originální systém s přidávným RF plazmatem generovaným v agregační komoře plynového zdroje nanočástic.
Kontakt: doc. Mgr. Jan Hanuš, Ph.D. e-mail: jan.hanus@matfyz.cuni.cz

Práce mají experimentální charakter a probíhají v návaznosti na běžící projekty GAČR.

Příprava a studium bimetalických nanokapalin se zajímavými optickými vlastnostmi



Nanokapaliny jsou koloidní roztoky nanočástic v kapalných médiích, buď ve vodě, olejích nebo kapalných polymerech. Nanokapaliny jsou známy více než 150 let a poprvé byly objeveny Faradayem, který syntetizoval koloidní zlato. Tento roztok ho zaujal především svou neobvyklou rubínovou barvou, která vznikla díky plazmonické aktivitě zlatých částic. Doposud byly různobarevné plazmonické nanokapaliny na bázi různých kovů syntetizovány především chemickými metodami, které nejsou ekologické a vyžadují dodatečné čištění od produktů chemické reakce. V rámci tohoto projektu budou jako alternativní fyzikální metody pro přípravu plazmonických nanokapalin využity magnetronové naprašování na povrch kapalin kompatibilních s vakuem a plynový agregační zdroj nanočástic. Kombinace těchto dvou metod na jednom depozičním zařízení umožňuje buď přípravu jednosložkových nanokapalin, například na bázi stříbra a zlata, nebo bimetalických kapalin.

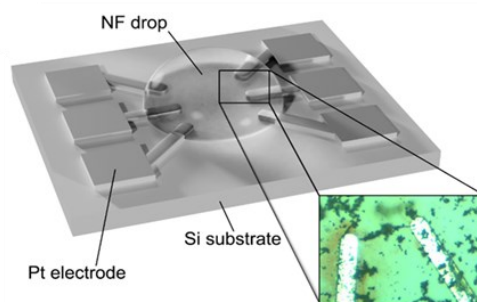
Cílem projektu je prozkoumat, jak se mění optické vlastnosti dvousložkové nanokapaliny ve srovnání s jednosložkovými, v závislosti na koncentraci jednotlivých kovů. Bude zjištěno, zda je možné měnit výslednou barvu nanokapaliny regulováním poměru kovů v bimetalické nanokapalině.

Práce má experimentální charakter a je součástí řešení grantového projektu **GAČR 23-06925S "Odporové přepínání v kovových nanokapalinách: nový přístup v neuromorfním inženýrství"**.

Kontakt: Dr. D. Nikitin, e-mail: daniil_nikitin@kmf.troja.mff.cuni.cz

Odporové přepínání v kovových nanokapalinách pro neuromorfní aplikace

Neuromorfní 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 neuromorfních 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.



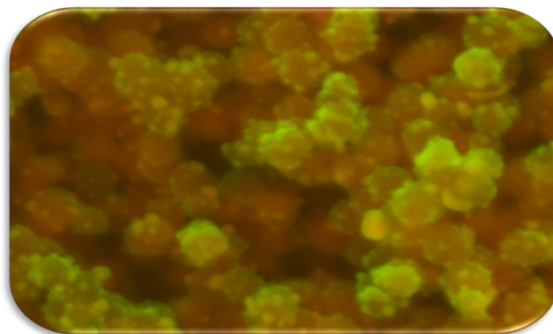
Cílem tohoto projektu je prozkoumat odporové spínací efekty v nanokapalinách kov/polymer. Jedno, popřípadě dvousložkové nanokapaliny budou připravovány pomocí depozice nanočástic z plynového agregačního zdroje do kapalného polymeru ve vakuu. Bude studován vliv koncentrace nanočástic, střední velikosti, distribuce velikostí a vlastností hostitelské kapaliny na odporové spínání. **Práce je součástí řešení grantového projektu GAČR.**

Práce má experimentální charakter a je součástí řešení grantového projektu **GAČR 23-06925S "Odporové přepínání v kovových nanokapalinách: nový přístup v neuromorfním inženýrství"**.

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

Příprava a studium dvousložkových nanomateriálů

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.



TiO₂ nanočástice dekorované nanočásticemi stříbra

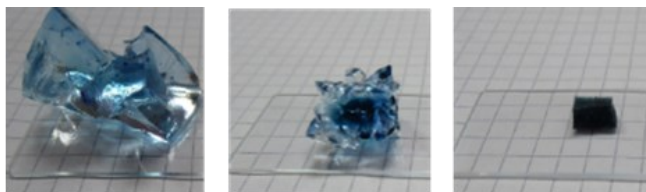
Cílem tohoto studentského projektu bude připravit jeden vybraný typ dvousložkové nanočásticové vrstvy a provést jeho detailní charakterizaci s ohledem na jeho morfologii, strukturu a optické vlastnosti. Konkrétní typ nanomateriálu studovaného v rámci tohoto projektu bude konkretizován po vzájemné domluvě i s ohledem na probíhající výzkumné projekty na KMF.

Práce má experimentální charakter a probíhá v návaznosti na běžící projekt **GAČR 25-14402L** „Zesílená spektroskopie na fotoaktivních hybridních kovových/polovodičových nanostrukturách“

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

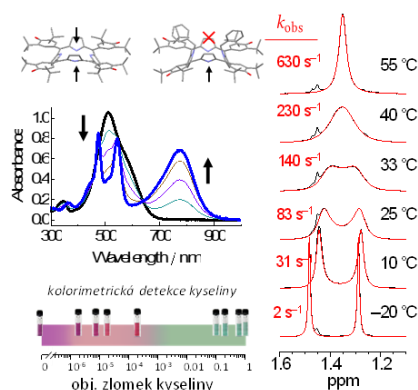
Spektroskopické studium derivátů porfyrinů

Porfyriny a jejich deriváty jsou makrocyclické sloučeniny se zajímavými vlastnostmi. Disponují vazebnými místy, které jim umožňují navázat organické molekuly, kyseliny nebo ionty. Díky jejich konjugovanému systému též absorbují světlo, čehož lze využít ke kolorimetrické detekci navázaných molekul v roztoku (viz obr.). V derivátech porfyrinů s navázanou kyselinou také probíhají různé dynamické molekulární procesy.

Vlastnosti derivátů porfyrinů lze studovat měřením nukleární magnetické rezonance (spektroskopie NMR) a absorpce světla (spektroskopie UV/vis). Fitování naměřených spekter příslušnými vazebnými či dynamickými modely umožňuje detailní kvantitativní popis studovaných systémů (viz obr.).

Cílem tohoto studentského projektu je prozkoumat vybrané vazebné či dynamické vlastnosti některého derivátu porfyrinu. Student se seznámí se spektroskopie NMR nebo UV/vis, které jsou základními metodami chemické fyziky a biofyziky, dále se zpracováním naměřených dat a jejich interpretací pomocí různých modelů.

obr. spektroskopie derivátů porfyrinů, kolorimetrie



Práce bude zahrnovat experimenty na spektrometru NMR či UV/vis a zpracování naměřených dat.

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

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, 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.

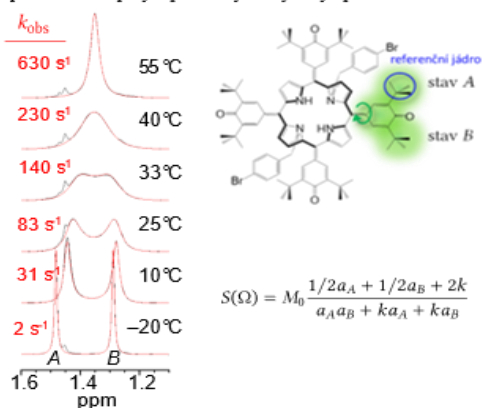
Cílem tohoto projektu je prozkoumat existující poznatky o agregaci ve vědecké literatuře, zreprodukovat vybrané agregační modely na počítači a popsat možnosti jejich použití. Student se seznámí s tvorbou modelů chemické kinetiky a simulací agregačních procesů.

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

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

Výpočet tvarů spekter s chemickou výměnou v NMR

obr. spektra NMR s chemickou výměnou náležející otáčení
postranní skupiny a příslušný analytický spektrální tvar



Spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) detekuje jádra atomů s magnetickým momentem. Sledované jádro může díky tzv. chemické výměně přecházet tam a zpět mezi dvěma či více stavy chemickými okolími. Chemická výměna nastává při vratné chemické reakci, přechodu mezi konformacemi molekuly, atd.

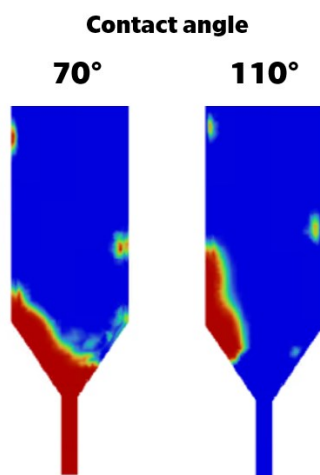
Rychlost chemické výměny (tj. kolikrát v průměru přejde dané jádro mezi stavy za sekundu) a další parametry chemické výměny ovlivňují tvar spektra NMR (viz **obr.**). Proto lze fitováním naměřených spektrálních tvarů získat podrobné informace o probíhajících dějích. Výpočet spektrálních tvarů je založen na kvantové mechanice, v některých případech však lze použít i přístupy klasické fyziky.

Cílem tohoto studentského projektu je spočítat analyticky nebo numericky spektra vybraných spinových systémů a použít je na fitování skutečných naměřených dat z literatury nebo měření vedoucího projektu. Student se seznámí se spektroskopií NMR se zaměřením na chemickou výměnu. Osvojí si postupy, které se používají u charakterizace např. enzymatických reakcí, komplexů typu host–guest nebo konformační dynamiky.

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

Práce bude zahrnovat analytické a numerické výpočty a zpracování experimentálních dat.

Změna smáčivosti reálných povrchů pro manipulaci vícefázovým prouděním v kosmické mikrogravitaci



Za běžných okolností (1g tíže) se povrchové napětí projevuje jako významná síla formující pohyb vícefázového (kapalina-plyn) proudění na površích až v milimetrových a sub-milimetrových rozměrech. V mikrogravitaci (např. na oběžné dráze Země) je však dominantní silou i na rozměrech řádově významně větších. To v oblasti kosmické techniky v mnoha případech na jednu stranu komplikuje návrh mnoha zařízení manipulujících s kapalinami, na druhou stranu naopak umožňuje využít fyzikálně-technické principy řízení toku kapalin v pozemních podmínkách nerealizovatelných.

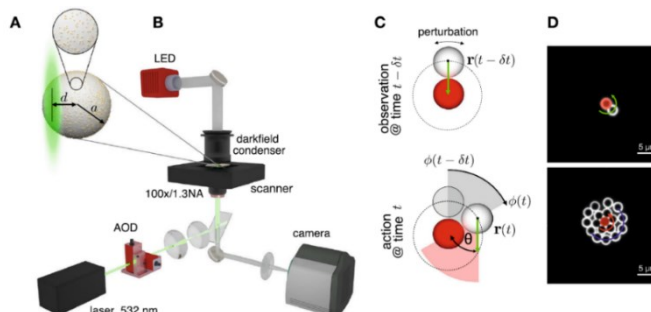
Hlavním cílem projektu je modifikace smáčivosti povrchů zejména vybraných polymerů v prakticky užívaných tvarech - nádobky, nádržky, hadičky. Student bude charakterizovat jak dosaženou míru změny smáčivosti, tak její homogenitu a trvanlivost.

Práce má návaznost na projekt řešený v blízké budoucnosti na ČVUT v Praze.

Kontakt: doc. Jaroslav Kousal, e-mail: jarda@kmf.troja.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.

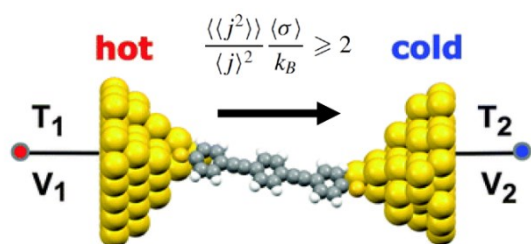


Cílem tohoto projektu je numericky zkoumat experimentálně relevantní systémy podobné jako ten na obrázku výše a hledat nové zajímavé efekty vyvolané zpožděním. Tím jednak dodáme inspiraci experimentátorům a přispějeme k lepšímu pochopení vlivu zpožděných interakcí v mikrosvětě.

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

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

