

## **Teplotní změny v tenkých vrstvách nanočástic**

*klíčová slova: nanočástice, teplota, elipsometrie*

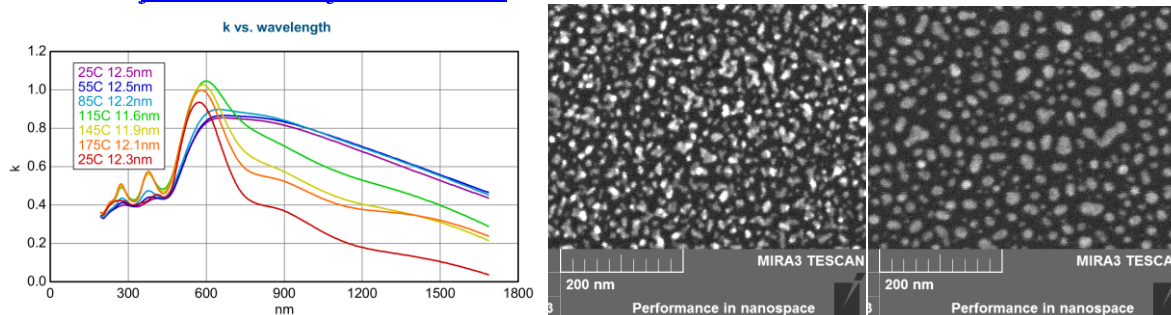
'Povrchové' a 'objemové' vlastnosti materiálů se mohou velmi lišit. Se zmenšováním objemu materiálu hrají povrchové vlastnosti čím dál větší roli. U částic nanometrových rozměrů jsou proto i jejich základní vlastnosti zřetelně odlišné od 'objemných' vzorků. Velmi zřetelně se to projevuje např. v průběhu různých jevů s teplotou (oxidace, tání, elektrická vodivost...). Tyto změny lze velmi dobře pozorovat opticky, metoda spektroskopické elipsometrie je jedna ze zvláště vhodných.

Vzorky tenkých vrstev nanočástic připravené v plynovém agregačním zdroji budou analyzovány in-situ elipsometrií během regulovaného ohřevu. To bude představovat hlavní část experimentální práce. Budou využity i snímky z elektronového mikroskopu a AFM, u elektricky vodivých částic bude možno měřit i jejich ex-situ vodivost.

*Práce má experimentální charakter.*

Vedoucí práce: Mgr. Jaroslav Kousal, Ph.D.

e-mail: [jarda@kmf.troja.mff.cuni.cz](mailto:jarda@kmf.troja.mff.cuni.cz)



## **Vazba proteinů na povrchy upravené plazmatem za atmosférického tlaku**

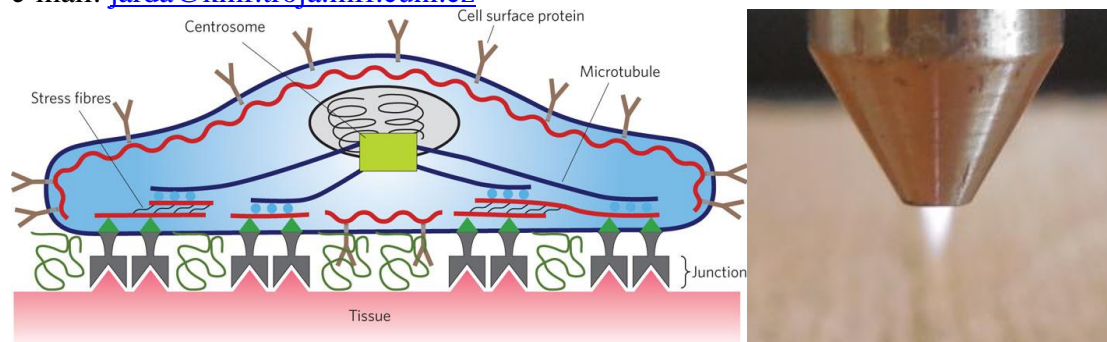
*klíčová slova: vysokotlaké nízkoteplotní plazma, proteiny*

S rozvojem biotechnologií stoupá význam studia interakce biomolekul s klasickými materiály. Jedním z problémů je stanovení optimálního způsobu vazby proteinů na umělé nosné struktury. Ke změně povrchových fyzikálních i chemických vlastností materiálů lze použít opracování v plazmatu. Lze tímto způsobem změnit morfologii povrchu, navodit přítomnost některých chemických funkčních skupin nebo indukovat vznik volných radikálů. Práce bude využívat vysokotlakou nízkoteplotní plazmovou trysku a dielektrický bariérový výboj pro účely modifikace povrchů, zejména polymerů. Následně bude studována adheze proteinů k takto upraveným povrchům.

*Práci lze zaměřit převážně experimentálně i teoreticky.*

Vedoucí práce: Mgr. Jaroslav Kousal, Ph.D.

e-mail: [jarda@kmf.troja.mff.cuni.cz](mailto:jarda@kmf.troja.mff.cuni.cz)



## **Příprava core-shell nanočástic pomocí plynového agregačního zdroje**

*klíčová slova: nanočástice, plynový agregační zdroj, magnetronové naprašování*

Nanočástice kovů či oxidů kovů jsou v dnešní době využívány v mnoha oborech lidské činnosti jako je např. lékařství, strojírenství či kosmetický průmysl. Zejména pro využití v lékařství, resp. pro bioaplikace, jsou požadovány stále lépe definované nanočástice s komplexní strukturou. Jedním z takovýchto typů nanočástic jsou tzv. core-shell nanočástice, kde jádro nanočástice (core) je z jednoho druhu materiálu, na něj je pak nanesen jiný typ materiálu – shell. Jedním z možných způsobů přípravy je využití plynového agregačního zdroje nanočástic a vzniklé nanočástice následně pokryt pomocí magnetronového naprašování druhým typem materiálu.

V rámci diplomové práce bude studován vliv depozičních podmínek na tloušťku slupky a vlastnosti nanočástic. U nanočástic budou zkoumány jejich chemické a optické vlastnosti, zobrazení nanočástic pak bude realizováno pomocí pokročilých zobrazovacích technik jako AFM, SEM či HRTEM.

Zásady pro vypracování

- 1) Seznámit se s problematikou vakuových metod přípravy nanočástic.
- 2) Seznámit se s používaným experimentálním vybavením.
- 3) Použít plynový agregační zdroj pro přípravu kovových nanočástic a provést jejich základní charakterizaci.
- 4) Připravit core-shell nanočástice pomocí magnetronového naprašování kovu na prolétající nanočástice a provést jejich základní charakterizaci.
- 5) Ověřit možnost přípravy heterogenních nanočástic modifikací stávajícího depozičního systému.

*Práce má experimentální charakter.*

Vedoucí práce: Mgr. Jan Hanuš, Ph.D.

e-mail: [jan.hanus@mff.cuni.cz](mailto:jan.hanus@mff.cuni.cz)

## **Dynamika schnutí kapek na površích s různou smáčivostí**

*klíčová slova: smáčivost, dynamika schnutí*

Smáčivost povrchů zásadním způsobem ovlivňuje interakci pevných látek s okolním prostředím. Studium smáčivosti různých povrchů tudíž představuje aplikačně velice zajímavé téma. Jedním směrem výzkumu, kterému je v poslední době věnována zvýšená pozornost, je studium dynamiky schnutí kapek různých kapalin a jejich roztoků s biomolekulami.

Tato bakalářská práce bude zaměřena na studium dynamiky zasychání kapek v závislosti na vlastnostech povrchů (chemické složení, morfologie, smáčivost). Nedílnou součástí této práce bude i studium schnutí kapek roztoků obsahujících vybrané biomolekuly a určení vlivu koncentrace roztoků na proces schnutí kapek. Práce předpokládá zvládnutí základních metod jak pro určování smáčivosti a povrchové energie materiálů, tak i pro určování chemického složení a morfologie povrchů.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí práce: doc. RNDr. Ondřej Kylián, Ph.D.

e-mail: [ondrej.kylian@gmail.com](mailto:ondrej.kylian@gmail.com)

## **Studium interakce nízkoteplotního plazmatu s polymery a biomolekulami**

*klíčová slova: nízkoteplotní plazma, biomolekuly, polymery, sterilizace*

Každodenně je po celém světě sterilizováno několik miliónů lékařských nástrojů s cílem zajistit bezpečnost pacientů, kteří s těmito nástroji přicházejí do kontaktu. Nicméně současné statistiky ukazují, že běžně používané sterilizační metody selhávají při eliminaci různých potenciálně patogenních biomolekul (např. bakteriálních endotoxinů či proteinů).

Z tohoto důvodu je velká snaha vyvinout nové metody, které by umožnily tento problém překonat. Jednou z alternativních sterilizačních metod, která je v současné době vyvíjena, je aplikace nízkoteplotního plazmatu generovaného za atmosférického tlaku. Ačkoliv existuje velké množství studií prokazujících sterilizační efekt takového plazmatu, mechanismus, jakým k eliminaci/inaktivaci patogenních látek dochází, není stále uspokojivě popsán.

Náplní této práce bude studium interakce plazmatu s modelovými systémy (polymery, nepatogenními biomolekulami). Připravené vzorky budou vystaveny působení plazmatu generovanému za atmosférického tlaku a jejich základní vlastnosti (morfologie, chemické složení) budou určeny pomocí analytických metod s cílem najít vztah mezi změnami vlastností materiálů vystavených plazmatu a parametry plazmatu.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí práce: doc. RNDr. Ondřej Kylián, Ph.D.

e-mail: [ondrej.kylian@gmail.com](mailto:ondrej.kylian@gmail.com)

### **Příprava a studium plazmově polymerních nanočástic**

*klíčová slova: plasmově polymerní nanočástice, plynově agregační nanočásticový zdroj, plazma, vakuum*

Plasmově polymerní nanočástice jsou nové a zatím málo prozkoumané téma. Vzhledem ke své podstatě a kovalentním vazbám mezi atomy uhlíku (případně jiných prvků jako kyslík, dusík a fluor) mají zcela unikátní mechanismus vzniku. Náplní práce bude studium vlivu složení směsi pracovního plynu na tvorbu, velikost a chemické složení nanočástic.

*Práce má experimentální charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. Pavel Solař, Ph.D.

e-mail: [pawell.solar@seznam.cz](mailto:pawell.solar@seznam.cz)

### **Nanokompozitní vrstvy pro biolékařské aplikace**

*klíčová slova:*

Provedení rešerše v oblasti přípravy kompozitních vrstev na bázi plazmových polymerů a jejich aplikací v biolékařství. Půjde zejména o aplikace antibakteriální a aplikace s cílem dosažení biokompatibility. V praktické části práce bude připravena nanokompozitní vrstva. Příkladem takové antibakteriální aplikace může být nanokompozitní vrstva kov/plazmový polymer.

*Práce má experimentální charakter.*

Vedoucí práce: Doc. Ing. Shukurov Andrey, Ph.D.

e-mail: [choukourov@kmf.troja.mff.cuni.cz](mailto:choukourov@kmf.troja.mff.cuni.cz)

### **Povrchová analýza plazmových polymerů pomocí skenovací sondové mikroskopie**

*klíčová slova: skenovací sondová mikroskopie, plazmový polymer, nano-struktura*

V rámci bakalářské práce bude zkoumána nanostruktura povrchu tenkých vrstev nanášených plazmovou polymerací. Vývoj drsnosti a vznik nano-struktury bude studován metodami skenovací sondové mikroskopie. K tomuto zkoumání bude využito zejména experimentální zařízení AFM mikroskop NTEGRA Prima.

*Práce má experimentální charakter.*

Vedoucí práce: Doc. Ing. Shukurov Andrey, Ph.D.

e-mail: [choukourov@kmf.troja.mff.cuni.cz](mailto:choukourov@kmf.troja.mff.cuni.cz)

## Mapování rezistivity metodou elektrické impedanční tomografie

**klíčová slova:** rezistivita, vodivost, impedanční tomografie, vodivé polymery

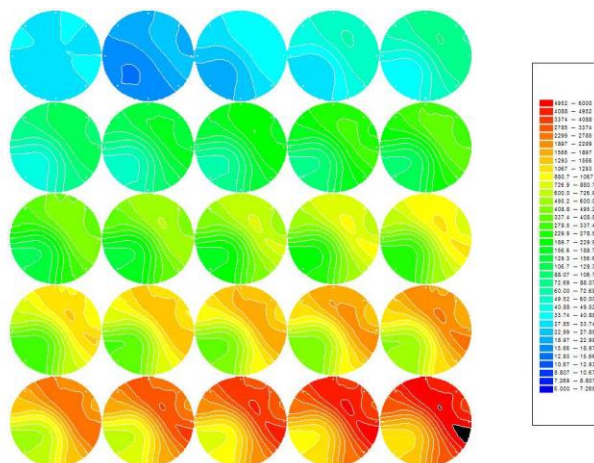
Elektrická impedanční tomografie (EIT) umožňuje zjistit rozložení rezistivity uvnitř heterogenního objektu a tak nedestruktivně sledovat jeho vnitřní strukturu a její změny. Teoretická část zahrnuje především pochopení základních principů metody, postupu měření a způsobu vyhodnocování. Praktickou část pak představuje změření a vyhodnocení map rezistivity pro vybrané polymerní vzorky.

Cílem práce je seznámit se s tomografickou metodou mapování rezistivity. Student se v rámci práce seznámí se základními principy řízení aparatury počítačem.

*Práce má převážně experimentální charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. I. Krivka, CSc.

e-mail: [krivka@semi.mff.cuni.cz](mailto:krivka@semi.mff.cuni.cz)



## **Změny elektrických vlastností vodivých polymerů při jejich stárnutí**

*klíčová slova: Změny elektrických vlastností vodivých polymerů při jejich stárnutí*

Stárnutí vodivých materiálů ovlivňuje jejich elektrické vlastnosti, což má zásadní význam pro jejich praktické použití. Předmětem studia je zkoumání těchto změn a vlivu různých faktorů (teplota, okolní atmosféra apod.) na tyto změny. Jako studijní materiál poslouží polypyrrol, případně polyanilin (a to jak v nanotubulární, tak v granulární formě), které patří mezi nejdůležitější představitele vodivých polymerů. Cílem bakalářské práce je zaznamenat a vyhodnotit změny elektrického odporu a dále určit případné změny mechanismu transportu elektrického náboje v závislosti na přípravě vzorků (tyto budou dodány) a na podmínkách jejich stárnutí.

Na pracovišti zadavatele je k dispozici příslušné experimentální vybavení.

*Práce má experimentální charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. J. Prokeš, CSc.

e-mail: [jprokes@semi.mff.cuni.cz](mailto:jprokes@semi.mff.cuni.cz)

## **Studium elektrických vlastností polypyrrolových nanotrubeček v závislosti na lisovacím tlaku**

*klíčová slova: kompozitní materiál, polyanilin, elektrický odpor*

Polypyrrol ve formě nanotrubeček je materiál s velmi slibnými vlastnostmi. Jeho resistivita závisí v určitém rozsahu na hodnotách tlaku, při kterém jsou vzorky připravovány. Cílem bakalářské práce je studium závislosti resistivity na tlaku, a to bezprostředně po nalisování a pak s časovým odstupem. Dále bude studován vliv opakovaného lisování vzorků. Na pracovišti zadavatele je k dispozici příslušné experimentální vybavení, materiál na vzorky bude dodán, jejich lisování bude provedeno na pracovišti.

*Práce má experimentální charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. J. Prokeš, CSc.

e-mail: [jprokes@semi.mff.cuni.cz](mailto:jprokes@semi.mff.cuni.cz)



## Studium elektricky vodivých materiálů založených na polyanilinu pomocí hřebenových elektrod

**klíčová slova:** hřebenové elektrody, polyanilin, elektrický odpor, metoda konečných prvků  
Jednou z důležitých vlastností vodivého polymeru, polyanilinu, je jeho schopnost snadno polymerizovat na široké škále povrchů za vzniku tenké vrstvy (typicky 100 nm) nebo vytvářet makroskopické třírozměrné vodivé materiály uvnitř nevodivé matrice (např. uvnitř hydrogelu). Oba zmíněné případy, t.j. tenké vrstvy a 3D struktury, mají velký význam pro praktické aplikace. Výhodou hřebenové elektrody oproti např. deskovému sendvičovému uspořádání je umístění elektrod jenom z jedné strany vzorku a své využití našla proto zejména v oblasti senzorů. V rámci této práce budou takové elektrody použity na studium DC/AC vlastností vodivých materiálů různé geometrie. Cílem bakalářské práce je seznámit se s problematikou vodivých polymerů, dále s principem hřebenové elektrody (případně s dalšími metodami měření elektrických vlastností) a simulacemi pomocí metody konečných prvků. Naměřená data budou vyhodnocena pomocí počítačových simulací s cílem určit materiálové vlastnosti, t.j. rezistivitu a permitivitu. Numerické výpočty budou také zaměřeny na stanovení rozsahu použitelnosti metody s ohledem na různou geometrii vzorků.

*Práce zahrnuje experimentální část (vlastní měření) i matematické modelování.*

Vedoucí práce: Mgr. M. Varga, Ph.D.

e-mail: [vargam@kmf.troja.mff.cuni.cz](mailto:vargam@kmf.troja.mff.cuni.cz)

## Elektrické a fotoelektrické vlastnosti některých organických polovodičů

**klíčová slova:** organické polovodiče, vodivost, pohyblivost, excitony, difúzní délka

Sluneční články, jejichž výroba je tak snadná, jako tisk novin, články tak ohebné, že je možné smotat je do role a které jsou přitom levné. To je perspektiva, kterou nabízejí organické polovodiče. Na rozdíl od anorganických polovodičů jsou tvořeny molekulami a jejich vlastnosti se mohou proto snáze modifikovat. Mohou se připravovat i z roztoků a jejich výroba navíc nevyžaduje vysokou-polovodičovou čistotu. Cena energie, kterou produkují anorganické sluneční články v našich zeměpisných šířkách, je zatím asi třikrát větší, než cena elektřiny z klasických elektráren. Využitím organických materiálů se náklady na výrobu slunečních článků sníží o řád, což umožní vyrábět elektřinu ekologicky ve větším rozsahu. V poslední době se proto provádí intenzivní výzkum vodivých organických materiálů, což se projevilo také v roce 2000 udělením Nobelovy ceny třem badatelům v tomto oboru. Nejvyšší dosahovaná účinnost organických slunečních článků je zatím asi 12%, ale jejich výhodou je nízká cena a velká rychlost produkce například tiskem na ohebné folie.



Na našem pracovišti se provádí komplexní výzkum elektrických a fotoelektrických vlastností organických polovodičů z hlediska aplikací ve fotovoltaice. Vývoji slunečních článků napomáhají diagnostické metody. Vyvinuli jsme bezkontaktní metodu snímání napětí generovaného světlem a vytvořili model popisující procesy transportu fotogenerovaného náboje v organické látce. Pomocí počítačového modelu lze tak určit některé důležité parametry, které určují účinnost článků. Tato metoda je experimentálně nenáročná a ve světě dosud neužívaná. Další bezkontaktní metodou je měření výstupní práce elektronů pomocí Kelvinovy sondy. Tento experiment spolu s cyklickou voltametrií, umožní určit pásové schéma materiálu. Pohyblivost volných nábojů je určována z odezvy elektrických pulsů vkládaných na usměrňující kontakt t.zv. metodou CELIV. Výzkum je prováděn ve spolupráci s tuzemskými a jedním zahraničním pracovištěm.

*Práce má převážně experimentální charakter.*

Vedoucí práce: Doc. RNDr. Jiří Toušek, CSc.

e-mail: [jiri.tousek@mff.cuni.cz](mailto:jiri.tousek@mff.cuni.cz)

## Elektrické vlastnosti přechodů organický polovodič-křemík

**klíčová slova:** organické polovodiče, volt-ampérová charakteristika, pohyblivost elektronů a děr

V posledních letech probíhá rozsáhlý výzkum vodivých polymerů pro aplikace. Nejperspektivnějšími aplikacemi jsou tenkovrstvé tranzistory, luminiscenční diody a sluneční články. Nanesením polymerní vrstvy na destičku z krystalického křemíku získáme diodu, z jejíž charakteristiky můžeme určit důležité vlastnosti polymeru.

Bude měřena volt-ampérová charakteristika ve stacionárním i pulzním režimu. Pro technologie budou připraveny křemíkové substráty, vyrobené diody budou měřeny na automatických aparaturách.

*Práce má převážně experimentální charakter.*

Vedoucí práce: Doc. RNDr. Jiří Toušek, CSc.

e-mail: [jiri.tousek@mff.cuni.cz](mailto:jiri.tousek@mff.cuni.cz)

## Transportní vlastnosti moderních organických polovodičů

**klíčová slova:** organické polovodiče, elektrická vodivost, pohyblivost nábojů, excitony

Organické polovodiče se dostaly do popředí zájmu především pro své budoucí uplatnění jako luminiscenční diody, sluneční články, tranzistory nebo detektory záření. Příprava těchto materiálů je poměrně jednoduchá a levná. I když bylo již dosaženo dobrých výsledků např. u slunečních článků a luminiscenčních diod, hledají se nové organické polovodiče s větší stabilitou, flexibilitou a výtěžností. Právě materiály na bázi benzodithiofenu jsou jedněmi z nich. Je zřejmé, že zkoumat jejich vlastnosti je důležité pro jejich budoucí uplatnění v praxi.

*Práce má převážně experimentální charakter.*

Vedoucí práce: Doc. RNDr. Jana Toušková, CSc.

e-mail: [touskova@karlov.mff.cuni.cz](mailto:touskova@karlov.mff.cuni.cz)

## Oddělení spektroskopie polymerů

*Témata bakalářských prací 2015/2016*

### Kolaps v hydrogelech

**Klíčová slova:** fázový přechod, hydrogel, NMR spektroskopie

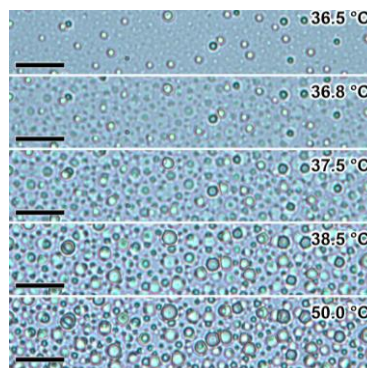
Hydrogely jsou měkké polymerní materiály obsahující značné množství vody. Některé z nich vykazují řádovou změnu objemu (10 – 1000) v závislosti na teplotě. Tento fázový přechod (kolaps) je makroskopický projev konformační změny polymerních řetězců, kdy původně volně pohyblivé řetězce se nad kritickou teplotou sbalí do kompaktních globulí a molekuly vody jsou z těchto zkolabovaných struktur vyloučeny. Schopnost hydrogelů reagovat na vnější podněty je zajímavá z aplikačního hlediska při přípravě tzv. „chytrých“ materiálových systémů jako jsou spínače, senzory apod.

Práce se bude zabývat fázovým přechodem v interpenetrujících sítích, které budou tvořeny dvěma polymerními sítěmi v různém složení. Jejich kolaps bude studován především metodami NMR spektroskopie.

*Práce má experimentální charakter.*

Vedoucí práce: doc. RNDr. L. Hanyková, Dr.

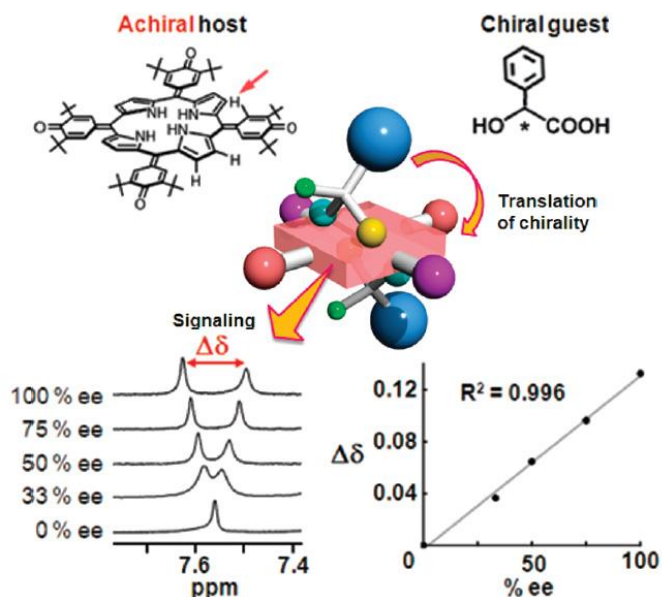
e-mail: [hanykova@kmf.troja.mff.cuni.cz](mailto:hanykova@kmf.troja.mff.cuni.cz)



## Studium chirálních vlastností supramolekulárních komplexů

**Klíčová slova:** chiralita, karboxylová kyselina, porfirin, NMR spektroskopie

Chiralita bývá u řady biologicky aktivních látek klíčovou informací. Mnohdy určuje, zda daná molekula bude lékem, nečinným prvkem nebo dokonce jedem. Při syntéze a farmaceutických aplikacích se proto klade důraz na určení enantiomerické čistoty a absolutní konfigurace chirálních center. NMR spektroskopie může u řady biologicky aktivních látek (např. kys. mandlová, kys. phenoxypropionová a některé aminokyseliny) tyto parametry určit. Využívá se zde tvorby tzv. host-guest komplexu chirální molekuly (*guest*) a achirálního derivátu porfirinu (*host*) (viz. obr.), kde *host* slouží jako detektor. V komplexu dochází k přenosu chirality, což se projevuje např. rozštěpením čáry chinonových protonů v NMR spektru, a to lineárně s enantiomerickým přebytkem (%*ee*). Jedná se o nový a značně neobvyklý



jev, jehož přesná podstata stále není známa. Její vysvětlení by značně přispělo k designu detektorů se specifickou selektivitou na další okruh chirálních látek, jako jsou komplexnější léčiva, oligopeptidy, pesticidy, atd. Taktéž by bylo možné velmi rychle a levně určit absolutní konfiguraci takovýchto látek.

Obsahem práce je určení stability a dynamiky komplexu pomocí metod NMR spektroskopie a porovnání vlastností komplexu pro několik různých chirálních molekul. Na základě takto získaných výsledků by měl být vytvořen model dynamického chování komplexu.

*Práce má převážně experimentální charakter.*

Vedoucí práce: doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.

e-mail: [hanykova@kmf.troja.mff.cuni.cz](mailto:hanykova@kmf.troja.mff.cuni.cz)

## Teoretický popis a simulace tvorby polymerních sítí

**klíčová slova:** struktura sítě, chemická kinetika, teorie větvicích procesů, Monte Carlo simulace

Struktura polymerních sítí má rozhodující vliv na jejich fyzikální a chemické vlastnosti, jež určují rovněž oblasti jejich možných aplikací. Kvantitativní popis formování struktury polymerních sítí je proto důležitý pro interpretaci a předpovídání vlastností sesíťovaných soustav. Jedna z metod přistupuje k vývoji struktury jako k procesu řízenému chemickou kinetikou. Odpovídající soustavu diferenciálních rovnic lze řešit numerickými metodami nebo Monte Carlo simulacemi. Pomocí chemické kinetiky však nelze získat strukturní informace o nekonečné molekule (molekule prostupující celým vzorkem) – gelu, která je klíčová pro mechanické a jiné vlastnosti. Výpočet strukturních parametrů gelu je možný jen v kombinaci se statistickými metodami (teorie větvicích procesů), avšak statistické metody jsou aproximací kinetických metod. Kvalitu této aproximace lze ovlivnit vzdáleností, do které respektujeme stochastické korelace.



Cílem práce je obeznámit se s oběma metodami, aplikovat je na jednoduché systémy a zkoumat závislosti vybraných strukturních parametrů na složení systému, reakčních mechanismech a stupni reakce. V oblastech, kde lze vypočítat strukturní parametry jak samotnou kinetickou metodou, tak i kombinací obou metod, zkoumat rozdíly, tj. kvalitu aproximace kombinace. Cílem je i obeznámit se s programováním v prostředí MATLAB nebo MATHEMATICA.

*Práce má teoretický charakter.*

Vedoucí práce: Ján Šomvársky, CSc.

e-mail: [somvarsky@kmf.troja.mff.cuni.cz](mailto:somvarsky@kmf.troja.mff.cuni.cz)

## **Částicové kompozity – simulace vztahu napětí a deformace pomocí metody konečných prvků**

*klíčová slova: částicové kompozity, kaučukovitá elasticita, bobtnání, metoda konečných prvků*

Termínem částicové kompozity se označují materiály tvořené polymerní maticí, která obsahuje částice obvykle anorganického tuhého materiálu – plniva. Částicové kompozity jsou důležitou třídou materiálů. Používají se jako konstrukční materiály, inženýrské materiály s unikátními vlastnostmi, ochranné nátěry, zubní materiály nebo plněné hydrogely hlavně v medicíně. Mechanické vlastnosti kompozitního materiálu závisí na stavu polymerní matrice (kaučukovitý nebo skelný) a na jejich mechanických vlastnostech (daných molekulární strukturou polymeru). Na vlastnosti kompozitu má vliv rovněž množství plniva, rozložení a tvar částic, kvalita adheze, vlastnosti mezivrstvy.

Cílem práce je obeznámit se s molekulárními modely kaučukovité elasticity a bobtnání, se základy metody konečných prvků a s programem COMSOL multiphysics, který tuto metodu využívá na řešení velmi širokého spektra fyzikálních a technických problémů, a na jednoduchém modelu přispět k porozumění vztahu mezi strukturou polymerní matrice a vlastnostmi kompozitu.

*Práce má teoretický charakter.*

Vedoucí práce: Ján Šomvársky, CSc.

e-mail: [somvarsky@kmf.troja.mff.cuni.cz](mailto:somvarsky@kmf.troja.mff.cuni.cz)

## Oddělení teoretické fyziky

*Témata bakalářských prací 2015/2016*

### **Termodynamika Parrondova stroje**

*klíčová slova: Parrondův paradox, stochastická termodynamika*

Zabývá se studiem Brownových motorů.

Strojů, které pracují v Brownově světě velkých fluktuací, například uvnitř živých buněk. Modelový systém, který bude v rámci práce zkoumán, funguje na principu tzv. Parrondova paradoxu. Zjištění, že jistou kombinací dvou her, jejichž pravidla jsou nastavena tak, aby hráčův kapitál vždy ve střední hodnotě klesal, je možno získat hru ve které bude hráč naopak ve středním smyslu profitovat.

Cílem práce je navrhnout a studovat konkrétní fyzikální model jehož dynamika bude vykazovat vlastnosti Parrondova paradoxu a zkoumat jeho termodynamické charakteristiky.

*Práce má teoretický charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. Viktor Holubec, Ph.D.

e-mail: [viktor.holubec@gmail.com](mailto:viktor.holubec@gmail.com)

### **Energetika v Ehrenfestově modelu a zákon velkých čísel**

*klíčová slova: Ehrenfestův model, stochastická termodynamika, zákon velkých čísel, flukтуаční teoremy*

Zabývá se studiem dynamiky a energetiky ve slavném Ehrenfestově urnovém modelu (také známého jako model psů a blech).

Tématem bakalářské práce bude zkoumat hustoty pravděpodobnosti pro termodynamické veličiny popisující energetiku v jistém zobecněném Ehrenfestova modelu. Konkrétně půjde o bližší charakterizaci konvergence těchto hustot pravděpodobnosti ke Gaussovu rozdělení, které by je mělo podle zákona velkých čísel popisovat, bude-li počet „blech“ velký.

Cílem práce je proniknout hlouběji do moderní partie termodynamiky, tzv. termodynamiky malých systémů.

*Práce má teoretický charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. Viktor Holubec, Ph.D.

e-mail: [viktor.holubec@gmail.com](mailto:viktor.holubec@gmail.com)

### **Stochastické stroje poháněné informací**

*klíčová slova: Stochastická termodynamika, Maxwellův démon, informace*

Zabývá se studiem Brownových motorů. Strojů, které pracují v Brownově světě velkých fluktuací, například uvnitř živých buněk. Konkrétně půjde o ty Brownovy motory, které ke svému chodu využívají informaci. Nejznámějším příkladem takového motoru je Maxwellův démon - stvoření, které využívá své znalosti systému k oddělení pomalých (studených) a rychlých (horkých) molekul. Výsledný teplotní rozdíl pak může pohánět klasický tepelný stroj.

Systémy, které budou v rámci práce zkoumány, fungují na podobném principu. Pouze „démon“ je nahrazen určitým fyzikálním systémem (např. dvoustavový systém) a „třídění molekul“ je nahrazeno např. posouváním částice na vyšší hladiny potenciálu.

*Práce má teoretický charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. Viktor Holubec, Ph.D.

e-mail: [viktor.holubec@gmail.com](mailto:viktor.holubec@gmail.com)

## **Quantum thermodynamics**

*klíčová slova: Quantum thermodynamics, stochastic thermodynamics*

Currently, the forefront of the stochastic thermodynamics is shifting more towards quantum processes, which potentially promises further ground-breaking paradigm changes as witnessed by the currently active (and controversial) topics of relevance of quantum-mechanical coherences for photosynthetic light harvesting systems and biological process in general (so called “Quantum Biology”) or efficiencies of solar cells. One of the research topics which immediately comes into consideration after finishing the above described running projects is to focus on thermodynamics in quantum regime, which is also the theme of the COST action in which I participate. The most promising area here is to investigate how quantum coherences may enhance performance of microscopic devices such as heat engines, i.e. solar cells and photosynthetic systems.

*Práce má teoretický charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. Viktor Holubec, Ph.D.

e-mail: [viktor.holubec@gmail.com](mailto:viktor.holubec@gmail.com)

## **Univerzální vlastnosti zobecněného Ehrenfestova modelu**

*klíčová slova: stochastická dynamika, Ehrenfestův model*

Obsahem práce bude teoretický popis stochastické dynamiky  $N$  nezávislých dvoustavových systémů (např. kvantových teček, viz ref. [1]). Dynamika každého jednotlivého systému je nemarkovovská a je určena jako tzv. proces obnovy [2]. Řešitel(ka) navrhne pravděpodobnostní popis modelu a důkladně prozkoumá vlastnosti modelu v závislosti na počtu systémů  $N$ . Při řešení lze postupovat analytickými metodami, zároveň ale výsledky výpočtů budou ověřeny a rozšířeny pomocí jednoduchých Monte Carlo simulací.

*Práce má teoretický charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. Artem Ryabov, Ph.D.

e-mail: [a.rjabov@seznam.cz](mailto:a.rjabov@seznam.cz)

## **Fázové přechody v nerovnovážných biologických systémech**

*klíčová slova: fázové přechody, nerovnovážné stacionární stavy*

Studium modelů transportu částic, hmoty, nebo energie v systémech udržovaných mimo termodynamickou rovnováhu tvoří důležitou oblast výzkumu moderní statistické fyziky. Tyto modely nacházejí uplatnění v různých situacích jako je transport skrze buněčné membrány, kinetika tvorby proteinů, růst povrchů, ale také slouží jako základní modely silniční dopravy [1, 2]. V této teoretické práci se zaměříme na studium dynamiky fázových přechodů [3], které v takových modelech mohou vznikat. Práce bude řešena z části přibližnými analytickými metodami, z části numericky (Monte Carlo simulace).

*Práce má teoretický charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. Artem Ryabov, Ph.D.

e-mail: [a.rjabov@seznam.cz](mailto:a.rjabov@seznam.cz)

## **Termodynamika molekulárních motorů**

*klíčová slova: molekulární motory, stochastická termodynamika*

Řada životně důležitých biologických procesů uvnitř buněk probíhá díky práci mikroskopických strojů, tzv. molekulárních motorů [1,2]. Tyto motory zajišťují téměř veškerý nitrobuněčný pohyb a transport. Aby dokázaly plnit své úlohy, jsou tyto stroje schopny přeměny různých forem energie (např. chemické) na mechanickou práci. Zároveň kvůli svým malým rozměrům (motorem může být i jediná makromolekula [3]) je jejich dynamika výrazně ovlivněna fluktuacemi okolního prostředí. V této teoretické práci se zaměříme na popis stochastické dynamiky a termodynamiky molekulárních motorů. Na

jednoduchém generickém modelu [4] budeme studovat stěžejní dynamické a termodynamické charakteristiky, a to buď analytickými metodami, nebo jednoduchými Monte Carlo simulaci.

*Práce má teoretický charakter.*

Vedoucí práce: RNDr. Artem Ryabov, Ph.D.

e-mail: [a.rjabov@seznam.cz](mailto:a.rjabov@seznam.cz)