

Oddělení fyziky vrstev a povrchů makromolekulárních struktur

Témata diplomových prací 2016/2017

Studium změn elektrické vodivosti emeraldinových solí vystavených pokojovým a mírně zvýšeným teplotám

klíčová slova: *polyanilin, stárnutí, rezistivita*

Polyanilin (a to zejména ve formě emeraldinové soli) je poměrně perspektivní polymerní materiál s dobrou elektrickou vodivostí, se kterým je počítáno pro řadu potenciálních aplikací. Z tohoto důvodu je nutné studovat jeho dlouhodobou stabilitu, zejména stabilitu elektrické vodivosti.

Cílem zadané diplomové práce je sledování vlivu různých dopantů na stabilitu elektrických vlastností materiálu vystaveného pokojovým či mírně zvýšeným teplotám. Bude studován materiál připravený v ÚMCH AV ČR, měřicí aparatury jsou k dispozici na KMF u zadavatele diplomové práce.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí: RNDr. Jan Prokeš, CSc.

e-mail: jprokes@semi.mff.cuni.cz

Optická emisní spektroskopie nízkotlakého plazmově polymeračního zdroje

klíčová slova: *plazmové zdroje, optická emisní spektroskopie*

Procesy plazmové polymerace většinou probíhají za tlaků nad 1 Pa. V některých typech plazmových zdrojů však lze deponovat vrstvy i za tlaků $<0,1$ Pa, kdy už je proudění plynu téměř bezsrážkové.

Cílem práce je část charakterizace nízkotlakého depozičního zdroje plazmatu vyvinutého pro účely směrové depozice vrstev. Student se bude podílet na měření a vyhodnocení optických emisních spekter plazmatu.

Práce má experimentální charakter.

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

e-mail: jarda@kmf.troja.mff.cuni.cz

In-situ elipsometrie plazmově polymerních vrstev

klíčová slova: *elipsometrie, tenké vrstvy*

Vlastnosti tenkých vrstev lze dobře studovat optickými metodami. Velmi mnoho informací lze získat ze spektroskopické elipsometrie.

Cílem práce bude podílet se na stavbě a provozu in-situ i ex-situ varianty spektroskopického elipsometru Woollam. Zkoumán bude proces depozice plazmově polymerních vrstev, případně jejich nanokompozitů s kovy a oxidy kovů.

Práce má experimentální charakter.

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

e-mail: jarda@kmf.troja.mff.cuni.cz

Studium homogenity elektrických parametrů organických vodivých materiálů v průběhu stárnutí

klíčová slova: vodivé polymery, elektrická impedanční tomografie, rezistivita

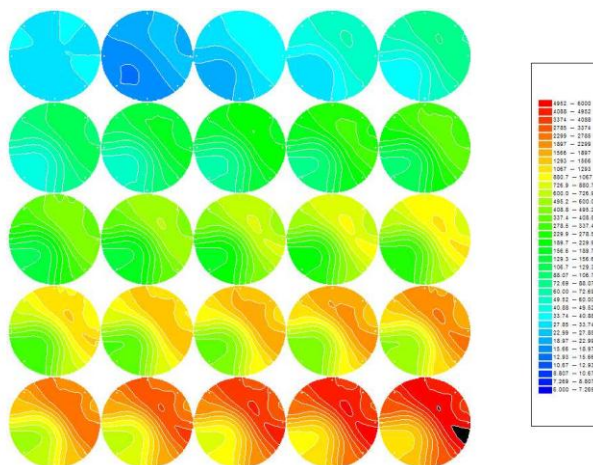
Polymerní materiály podléhají i za běžných podmínek chemickým a strukturálním změnám, které mají za následek postupnou změnu fyzikálních vlastností. Pro účely testování materiálových vlastností v laboratorních podmínkách se běžně stárnutí kontrolovaně urychluje (nejčastěji zvýšením teploty). V případě vodivých polymerů je nejvýznamnější fyzikální veličinou rezistivita. V průběhu stárnutí jsou změny rezistivity a vývoj jejich nehomogenit odrazem proměn chemické struktury. Elektrická impedanční tomografie (EIT) umožňuje průběžně sledovat rozložení rezistivity uvnitř měřeného objektu a tak nedestruktivně studovat homogenitu strukturálních změn.

Cílem práce je porovnat vliv stárnutí na různě připravené vodivé polymerní materiály na základě průběžného mapování rezistivity metodou EIT prováděného při teplotním stárnutí.

Práce má převážně experimentální charakter.

Vedoucí práce: RNDr. I. Křivka, CSc.

e-mail: krivka@semi.mff.cuni.cz



Příprava vícesložkových nanokompozitních tenkých vrstev

klíčová slova: nanočástice, nanokompozit, tenké vrstvy

Nanokompozitní tenké vrstvy jsou jednou z aplikačně nejzajímavějších skupin materiálů. To je dáno možností cíleně měnit jejich výsledné vlastnosti v širokém rozsahu hodnot (např. elektrickou vodivost, optické vlastnosti, bioresponsivní a antibakteriální vlastnosti). V současné době nanokompozitní materiály kombinující kov s dielektrickou maticí nacházejí uplatnění například ve fotovoltice, při výrobě senzorů, či v biolékařských aplikacích.

Cílem práce je studium přípravy vícesložkových nanokompozitních vrstev pomocí metod založených na nízkoteplotním plazmatu. Budou připraveny nanokompozitní vrstvy kombinující různé kovové nanoklastry (např. Ag,Cu,Au) produkované pomocí agregačních nanoklastrových zdrojů s dielektrickou maticí (např. plazmový polymer, SiO_x) deponovanou pomocí magnetronového naprašování, popřípadě plazmovou polymerací z plynného prekursoru. Bude studován vliv depozičních podmínek na vlastnosti výsledných vrstev, zejména na jejich optické vlastnosti, chemické složení a drsnost. Pozornost bude věnována i stabilitě připravených nanokompozitních vrstev ve vodném prostředí.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí práce: RNDr. Ondřej Kylián, Ph.D.
e-mail: ondrej.kylian@gmail.com

Modifikace nanočástic pomocí tubulárního naprašovacího systému

klíčová slova: nanočástice, plynový agregační zdroj, core-shell nanočástice

Pro vakuovou depozici nanočástic jsou v současné době hojně využívány plynové agregační zdroje Haberlandova typu, kde jako zdroj materiálu pro tvorbu částic slouží planární magnetron. Jednou z nevýhod planárních magnetronů je poměrně nízká využitelnost terče, typicky pod 20%. V důsledku tvorby erozní dráhy na terči navíc dochází ke změně magnetického pole na povrchu terče, což vede k časové nestabilitě takového systému. Jedním z řešení je nahradit planární magnetron tzv. tubulárním naprašovacím systémem, kde dochází k rovnoměrnému odprašování z celého povrchu katody (terče) a navíc, materiál který není spotřebován k tvorbě klastů se redeponuje opět na katodu a nedochází tak k jeho nežádoucímu úbytku a ke kontaminaci plynového agregačního zdroje. Tento systém může být také použit pro modifikaci již vzniklých nanočástic. V tomto případě nanočástice připravené pomocí plynového agregačního zdroje budou při následném průletu magnetronem porývány materiálem katody.

V rámci diplomové práce budou zkoumány podmínky pro účinné pokrytí proletujících nanočástic materiálem naprašovaným v tubulárním systému. Bude také zkoumána možnost přípravy nanočástic v tomto systému. Bude zkoumáno prvkové složení nanočástic a jejich optické vlastnosti. Velikost nanočástic bude analyzována pomocí AFM, SEM či HRTEM. Pomocí XPS a EDX bude zkoumán vliv pokrytí nanočástice na vlastnosti jádra, zejména pak bude studována jeho oxidace.

Zásady pro vypracování

- 1) Seznámit se s problematikou přípravy nanočástic pomocí plynového agregačního zdroje.
- 2) Seznámit se s používaným experimentálním vybavením.
- 3) Modifikovat nanočástice připravené v agregačním zdroji s planárním magnetronem pomocí tubulárního naprašovacího systému a provést jejich základní charakterizaci.
- 4) Studovat vliv slupky u core-shell nanočástic na vlastnosti jádra, zejména pak oxidaci.
- 5) Provéřit možnost přípravy nanočástic pomocí tubulárního naprašovacího systému.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí práce: Mgr. Jan Hanuš, Ph.D.
e-mail: jan.hanus@gmail.com

Oddělení spektroskopie polymerů

Témata diplomových prací 2016/2017

Studium dielektrického chování kapalně-krytalických materiálů

klíčová slova: dielektrická spektroskopie, kapalně krystalické polymery

Dielektrická spektroskopie představuje účinnou experimentální metodu vhodnou pro studium struktury látek s permanentním dipólovým momentem. Pro studium fyzikálních vlastností kapalně krystalických materiálů je tato metoda obzvlášť vhodná vzhledem k tomu, že hlavní součást kapalných krystalů - mezogenní jednotky – mají díky svému protáhlému tvaru značný dipólový moment, což umožní sledovat změny struktury těchto materiálů měřením složek komplexní permitivity odpovídající různým strukturám v závislosti na frekvenci a teplotě.

Cílem práce je proměření dielektrických vlastností kapalně krystalických látek v širokém teplotním a frekvenčním oboru a z výsledků měření stanovit různé pohybové módy kapalných krystalů v závislosti na teplotě a frekvenci.

Práce má experimentální charakter.

Vedoucí práce: Doc. RNDr. Jan Nedbal, CSc.

e-mail: nedbal@kmf.troja.mff.cuni.cz

Studium termomechanických a elektrických vlastností polymerních elektrolytických membrán

klíčová slova: *palivový článek, polymerní elektrolytická membrána*

Moderní trendy ekologického získávání a skladování elektrické energie jsou spojeny s tzv. vodíkovými technologiemi. Perspektivní způsob výroby elektrické energie se realizuje v tzv. vodíkových palivových článcích. Základní komponentou tohoto článku je polymerní elektrolytická membrána. Nejužívanější membrány tohoto typu jsou Nafion (firma Dupont, USA, viz. http://www2.dupont.com/FuelCells/en_US/products/nafion.htm) a nebo Ralex (firma MEGA a.s., CZ, viz <http://www.mega.cz/heterogenni-iontomenicove-membrany-ralex.html>).

Cílem práce je stanovit termomechanické a elektrické vlastnosti některé z výše uvedených polymerních membrán v souvislosti s jejich konkrétní molekulární strukturou. Jde především o: 1. změnu mechanických a elektrických vlastností se změnou teploty při dlouhodobém provozu, 2. změnu molekulární struktury na teplotě a na čase, 3. stabilitu měřených vlastností při změně prostředí (koncentrace vlhkosti, vodíku kyslíku, vzduchu apod.) a termodynamickou analýzu zjištěných závislostí, především pak vlivu vlhkosti a teploty na elektrickou vodivost, 4. matematickou formulaci naměřených závislostí.

Podle zájmu studenta je možné zvolit charakter práce (experimentální studium nebo teoretický popis).

Vedoucí práce: Doc. RNDr. Ivan Krakovský, CSc.

e-mail: ivank@kmf.troja.mff.cuni.cz

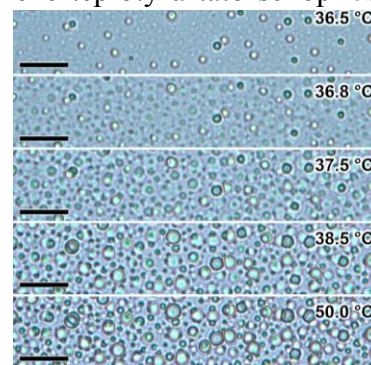
Kolaps v hydrogelech

klíčová slova: *přechod klubko-globule*

Některé polymery rozpustné ve vodě vykazují tzv. dolní kritickou rozpouštěcí teplotu (LCST); zatímco při nízkých teplotách jsou polymerní řetězce roztoku ve fázi flexibilního klubka s převládajícími interakcemi polymer-rozpouštědlo, zvýšení teploty vede k fázové separaci a řetězce tvoří kompaktní globule s dominantními hydrofóbními interakcemi polymer-polymer. Jev fázové separace v polymerních roztocích má analogii v tzv. kolapsu hydrogelů, během kterého polymerní síť přecházejí z nabotnalého stavu do stavu zkolabovaného. Hydrogely připravené na bázi polymerů vykazujících LCST skokově mění svůj objem při malé změně teploty a tato schopnost vedla k rozvoji „inteligentních“ hydrogelů pro řízené uvolňování léků, robotiku a jiné aplikace.

Spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) umožňuje detailně sledovat interakce polymer-polymer a polymer-rozpouštědlo, pohyblivost polymerních segmentů a molekul rozpouštědla.

Cílem práce bude prostudovat strukturní a dynamické změny v polymerních roztocích pomocí spektroskopie NMR. Důraz bude kladen na relaxační metody a měření difúzních koeficientů umožňující charakterizovat dynamické chování molekul v roztoku.



Práce má experimentální charakter.

Vedoucí práce: doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.
e-mail: 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 chiralit, 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

Teoretický popis a simulace tvorby polymerních sítí

klíčová slova: *struktura sítě, chemická kinetika, teorie větvících 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 (Smoluchovského koagulační rovnice). Kombinací řešení soustavy kinetických diferenciálních rovnic a statistických metod (teorie větvících procesů), nebo Monte Carlo simulacemi lze vypočítat požadované strukturní parametry.

Cílem práce je obeznámit se s metodami a podle svého zájmu zvolit jednu z nich. Je možné zaměřit se víc na nové teoretické formulace a řešení problému nebo s využitím již existujících programů zkoumat různé závislosti strukturních parametrů na složení systému, reakčních mechanismech a stupni reakce. Práce je vhodná i pro více studentů, z nichž každý zvolí jinou metodu či přístup, které pak srovnají.

Práce má teoretický charakter.

Vedoucí práce: Ján Šomvářsky, CSc.
e-mail: somvarsky@kmf.troja.mff.cuni.cz

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

klíčová slova: *částicové kompozity, kaučukovitá elasticita, 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 tuhé výbušniny. Vlastnosti kompozitního materiálu závisí na stavu matrice (kaučukovitý nebo skelný). Vztah napětí a deformace silně závisí na molekulární struktuře 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, 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, objemovým zlomkem plniva, distribucí rozmístění a tvaru částic plniva na straně jedné a vlastnostmi kompozitu na straně druhé.

Práce má teoretický charakter.

Vedoucí práce: Ján Šomvářsky, CSc.

e-mail: somvasky@kmf.troja.mff.cuni.cz

Oddělení teoretické fyziky

Témata diplomových prací 2016/2017

Zkoumání nových definic termodynamické účinnosti

klíčová slova: *Stochastická termodynamika, definice termodynamické účinnosti, Brownovské motory*

Tradiční definice termodynamické účinnosti tepelného motoru je dána podílem středních hodnot práce konané motorem a celkového motorem přijatého tepla. V roce 1824 objevil Sadi Carnot maximální hodnotu této veličiny - tzv. Carnotovu účinnost. Tato účinnost tvoří ústřední koncept klasické termodynamiky. Mimo jiné vedla k objevu 2.

termodynamického zákona a k definici Kelvinovy teplotní stupnice.

Malé (mezoskopické) motory pracují v "Brownově hájemství" velkých fluktuací. V takovém prostředí představuje i tok energie z/do systému náhodnou veličinu. K popisu těchto motorů je tedy lepší použít fluktuující účinnost. Autoři nedávné studie [6] dokázali s použitím fluktuačního teorému identifikovat tři univerzální vlastnosti této fluktuující účinnosti. 1) Nejmeně pravděpodobná hodnota fluktuující účinnosti vždy souhlasí s Carnotovou účinností. 2) Nejpravděpodobnější hodnota fluktuující účinnosti vždy souhlasí s tradiční definicí účinnosti popsanou o odstavec výše. 3) Celá distribuce pro fluktuující účinnost je v případě pomalých (kvazistatických) procesů určena charakteristikami motoru získanými pomocí lineární odezvy.

Práce má teoretický charakter. Konkrétně se zabývá oblastí "stochastické termodynamiky". Hlavním cílem práce je demonstrovat obecné výsledky studie [6] na srozumitelném, analyticky řešitelném modelu.

Práce má teoretický charakter.

Vedoucí práce: RNDr. Viktor Holubec, Ph.D.
e-mail: viktor.holubec@gmail.com

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

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 simulacemi.

Práce má teoretický charakter.

Vedoucí práce: RNDr. Artem Ryabov, Ph.D.
e-mail: A.Rjabov@seznam.cz