

# Témata studentských projektů 2014/2015

- Studium drsnosti tenkých polymerních vrstev připravovaných magnetronovým naprašováním kombinovaným s depozicí nanoklastrů
- Příprava kovových nanoklastrů a studium jejich stárnutí
- Studium změn elektrického odporu vodivých polymerů
- Metoda elektrické impedanční tomografie
- Konstrukce aparatury pro měření výstupní práce v organických polovodičích
- Kolaps v hydrogelech
- Studium polymerního hydrogelu pomocí rozptylu neutronů a X-paprsků
- Charakterizace hydrogelů pro použití k orientaci molekul
- Kalibrace termočlánků pro sondy nukleární magnetické rezonance (NMR)
- Studium komplexace a LCST chování porfyrinů pomocí NMR spektroskopie
- Studium porfyrinů - tvorba komplexů a fázová separace
- Teoretický popis struktury polymerních sítí – pravděpodobnostní metody.
- Modelování mechanického chování částicových kompozitů metodou konečných prvků.
- Určení teplot fázových přechodů termotropních kapalně-krytalických polymerů pomocí dielektrické spektroskopie
- Teoretická analýza Brownova motoru. Dynamika a energetické charakteristiky.
- Krizové dopravní situace při transportu na molekulárních dálnicích.
- Bose-Einsteinova kondenzace ve stochastických systémech interagujících částic.
- Šumem indukované fázové přechody ve fyzice a biologii.
- Energetika v Ehrenfestově modelu a zákon velkých čísel.

Tento seznam není uzavřený. V případě zájmu je možné po domluvě s vyučujícím vypsát i další témata.



# Oddělení fyziky vrstev a povrchů makromolekulárních struktur

## **Studium drsnosti tenkých polymerních vrstev připravovaných magnetronovým naprašováním kombinovaným s depozicí nanoklastrů**

*Vedoucí: RNDr. Ondřej Kylián, PhD.*

Jedním z parametrů ovlivňujících výsledné vlastnosti tenkých polymerních vrstev je jejich povrchová drsnost. Typickými příklady vlivu drsnosti na funkcionalitu deponovaných vrstev je změna jejich smáčivosti, jejich schopnost vázat biomolekuly či podporovat proliferaci adsorbovaných buněk. Pro úspěšnou aplikaci tenkých polymerních vrstev je tedy nutná znalost jejich povrchové drsnosti a zejména možnost jejího ovlivnění bez vlivu na chemické složení povrchu. Jednou z možností jak dosáhnout tohoto cíle je použití nanoklastrů, či nanočástic, které se nanesou na substrát před vlastní depozicí polymerní vrstvy.

Cílem práce bude připravit vrstvy plazmových polymerů a to jak bez předchozí depozice nanoklastrů, tak i po ní, přičemž nanášení nanoklastrů bude provedeno za různých podmínek vedoucích k jejich různé povrchové hustotě i velikosti. Následně bude provedeno srovnání připravených vrstev s ohledem na jejich výslednou drsnost pomocí mikroskopie atomárních sil.

## **Příprava kovových nanoklastrů a studium jejich stárnutí**

*Vedoucí: RNDr. Ondřej Kylián, PhD.*

Kovové nanoklastry nalézají díky svým unikátním vlastnostem uplatnění v širokém spektru aplikací, jako jsou například palivové články, dekorativní povlaky, optoelektronika, výroba biosenzorů či příprava antibakteriálních vrstev. Z hlediska možného použití kovových nanoklastrů je jedním z limitujících faktorů jejich možné stárnutí, tj. změna jejich vlastností (chemické složení, velikost, elektrické vlastnosti atd.) s časem.

Cílem tohoto projektu je seznámit se jednak se způsoby přípravy kovových nanoklastrů pomocí agregačních zdrojů, jednak studovat změny vlastností takto připravených vrstev s časem pomocí různých diagnostických technik.

## **Studium změn elektrického odporu vodivých polymerů**

*Vedoucí: RNDr. Jan Prokeš, CSc.*

Vodivé polymery jsou specifické polymerní látky, u kterých se zkoumání jejich elektrických vlastností neomezuje pouze na vlastnosti dielektrické. Tyto látky v důsledku dopování poměrně snadno vedou elektrický proud. Uvedená vlastnost však není stálá, mění se v čase a pochopitelně také silně závisí na způsobu přípravy vodivých polymerů, na jejich zpracování apod.

Cílem projektu je seznámit se s procesy změn elektrické vodivosti, a to zejména u polyanilinu a polypyrrolu, které jsou typickými představiteli této skupiny látek. Student se postupně obeznámí s experimentálními měřicími technikami, programy na zpracování dat, s některými teoretickými přístupy, které studované jevy vysvětlují. V případě zájmu je možné seznámit se s modelováním rozložení náboje při různém uspořádání elektrod aj. U proměřených vzorků se pokusí zpracovat a vyhodnotit experimentální data, a to s ohledem na přípravu a historii vzorků.

### **Metoda elektrické impedanční tomografie**

*Vedoucí: Doc. RNDr. Ivo Křivka, CSc.*

Elektrická impedanční tomografie (EIT) umožňuje zjistit rozložení rezistivity uvnitř plochého heterogenního objektu a tak nedestruktivně sledovat jeho vnitřní strukturu a její změny.

Základním principem EIT je měření impedance (ve stejnosměrném režimu se měří elektrický odpor) s využitím velkého počtu kontaktů rozmístěných po obvodu objektu. Pro zjednodušení se zpravidla používá vzorek ve tvaru kruhu. Vybraná dvojice sousedních kontaktů se použije pro přivedení proudu a pak se zjistí rozložení potenciálu na ostatních elektrodách. Na základě potenciálového profilu se vypočítá rezistivita pro ekvipotenciální řezy (proto tomografie), které se vějířovitě rozevírají z mezery mezi proudovými kontakty. Potom se přivede proud na další dvojici kontaktů a algoritmus se opakuje. Takto se postupně využijí všechny dvojice sousedních kontaktů jako proudové. Na základě křížení řezů se pak získá mapa rezistivity pro celou plochu.

V rámci projektu se student seznámí s principy metody, postupem měření a algoritmy vyhodnocování. Student má možnost si vyzkoušet některé postupy užívané při vytváření aparatur řízených počítačem. Student použije EIT ke studiu homogenity elektrických parametrů na vybraných vodivých polymerních vzorcích.

### **Konstrukce aparatury pro měření výstupní práce v organických polovodičích**

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

Cílem tohoto projektu je dokončit konstrukci Kelvinovy sondy a prověřit její funkci z hlediska citlivosti a reprodukovatelnosti výsledků. Provést několik prvních měření, výsledky porovnat s literaturou.

# Oddělení spektroskopie polymerů

## Kolaps v hydrogelech

*Vedoucí: Doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.*

Problematika fázového přechodu (kolapsu) v hydrogelních systémech je zajímavá nejen z teoretického hlediska, ale našla i široké využití v praxi. „Inteligentní“ hydrogely přecházejí při malé změně vnějších podmínek (např. teploty) skokově z nabobtnalého do zkolabovaného stavu. V důsledku toho dochází k výrazné změně fyzikálních vlastností hydrogelu, objem může poklesnout 10 – 1000krát. Z mikroskopického hlediska se jedná o změnu v uspořádání polymerních řetězců způsobenou rozrušením vodíkových můstků mezi polymerními skupinami a molekulami rozpouštědla a převládajícími hydrofobními interakcemi. Detailní chemická struktura polymerů a interakce s molekulami rozpouštědla mají při fázové separaci významnou roli a spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) umožňuje tyto interakce podrobně studovat.

Během řešení projektu se student seznámí s experimentálními metodami NMR spektroskopie a některé z nich použije pro studium fázového přechodu v polymerních hydrogelech.

## Studium polymerního hydrogelu pomocí rozptylu neutronů a X-paprsků

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

Polymerní síť složená z hydrofilních polymerních řetězců absorbuje vodu, čímž vzniká polymerní hydrogel. Množství absorbované vody je výsledkem jemné rovnováhy mezi pružností polymerní sítě a interakcí polymerních řetězců s vodou. Objem hydrogelu proto velice citlivě reaguje na vnější podněty, jako např. změnu teploty, tlaku, elektrického pole nebo přítomnost dalších látek přítomných ve vodě. Na molekulární úrovni přitom dochází k zajímavé adaptaci struktury hydrogelu na změněné podmínky. Informace o ní poskytuje rozptyl pomalých neutronů a X-paprsků v oblasti malých úhlů.

Možnost řídit objem hydrogelu vnějšími podněty je základem jejich využití v mnoha moderních aplikacích, jako např. mikrosenzorech, mikroaktuátorech nebo displejové technice.

Během řešení projektu se student seznámí s experimentálními metodami studia fázového chování a struktury polymerních hydrogelů pomocí rozptylových metod na nejmodernějších přístrojích.

## **Charakterizace hydrogelů pro použití k orientaci molekul**

*Vedoucí: RNDr. Hana Kouřilová, Ph.D.*

Málokteré materiály mají tak široké využití v praxi jako hydrogely. Až 90% jejich objemu tvoří voda, zbytek jsou zesíťované polymerní řetězce. U některých hydrogelů může při změně některého vnějšího parametru (teplota, pH,...) dojít ke kolapsu, kdy hydrogel vyloučí ze svého objemu vodu a tím mnohonásobně zmenší svůj objem. Tento proces je vratný.

Hydrogely se využívají při určování struktury biomolekul metodou nukleární magnetické rezonance, kdy se proteiny (nebo třeba bakterie) zorientují do požadovaného směru. Přímá dipól-dipólová interakce mezi dvěma jádry (dvěma magnetickými dipóly) obsahuje informaci o prostorovém uspořádání těchto dvou jader vzhledem k vnějšímu magnetickému poli. V izotropním roztoku díky rotační difúzi dochází k jejímu vystředování. Pokud ale docílíme částečné orientace molekul, toto vystředování už nebude úplné a strukturální informace se dá extrahovat z těchto reziduálních dipolárních kaplingů. Při určování struktur biomolekul se jako orientující médium používá akrylamidový hydrogel a anizotropní prostředí se vytváří mechanickým působením. Naše skupina se snaží implementovat použití inteligentních hydrogelů, kde se pro dosažení určitého stupně orientace dá využít závislosti stupně nabobtnání hydrogelu na změně parametru, na který je hydrogel citlivý. Práce studenta bude spočívat v charakterizaci připravených hydrogelů a seznámí se se základy nukleární magnetické rezonance.

## **Kalibrace termočlánků pro sondy nukleární magnetické rezonance (NMR)**

*Vedoucí: RNDr. Hana Kouřilová, Ph.D.*

Práce bude spočívat v teplotní kalibraci termočlánků používaných v sondách nukleární magnetické rezonance. Student se seznámí se základy NMR.

## **Studium komplexace a LCST chování porfyrinů pomocí NMR spektroskopie**

*Vedoucí: RNDr. Hana Kouřilová, Ph.D.*

Porfyriny, nejstudovanější makrocyclické systémy, mají mnoho užitečných vlastností. Mohou tvořit komplexy s kyselinami nebo kationty kovů, tzv. interakce host-hostitel (host-guest). Na kationty kovů mohou být například dále navázány různé ligandy, které umožní katalytickou aktivitu. Ačkoliv jsou porfyriny achirální, dokáží po komplexaci detekovat chiralitu molekuly hosta. V biologických systémech mají porfyriny významnou roli jako fotosyntetické antény a komponenty reakčních center, nacházejí se v hemu, v koenzymu B12. Naši kolegové z NIMS v Japonsku objevili novou třídu porfyrinů, které k této vlastnosti vykazují navíc schopnost fázové separace. Při pokojové teplotě jsou rozpuštěny ve vodě, při ohřevu nad tzv. dolní

kritickou rozpouštěcí teplotu (lower critical solution temperature, LCST) dojde k fázové separaci. Molekuly vykazující LCST chování jsou ve velké většině případů polymery, u malých molekul je známo jen velmi málo případů. Cílem projektu bude studium vlastností porfyrinů jak samotných bez hosta, tak v komplexu s kyselinou, a také změny těchto vlastností s teplotou. Ke studiu bude použita spektroskopie nukleární magnetické rezonance.

### **Studium porfyrinů - tvorba komplexů a fázová separace**

*Vedoucí: RNDr. Hana Kouřilová, Ph.D.*

Porfyriny jsou molekuly tvořené 4 modifikovanými pyrrolovými jednotkami spojenými do kruhu pomocí =CH- spojek, jejich deriváty pak můžou například mít na těchto spojkách nasubstituovány další skupiny, navržené tak, aby derivát vykazoval určité vlastnosti, například rozpustnost v polárních rozpouštědlech. Jedna z obecných vlastností porfyrinu a jeho derivátů je schopnost tvořit komplexy s jinými molekulami či ionty. Tvorba komplexu vede ke změně pi-elektronové struktury a konformace porfyrinu, a tím i ke změně barvy pozorovatelné pouhým okem. Naši spolupracovníci z NIMS v Japonsku objevili novou skupinu porfyrinů, která navíc k těmto zajímavým vlastnostem ještě vykazuje chování podobné fázové separaci v polymerních roztocích. Zatímco při pokojové teplotě jsou tyto porfyriny rozpuštěné, při ohřevu nad tzv. dolní kritickou rozpouštěcí teplotou (lower critical solution temperature, LCST) dochází k fázové separaci. Materiály s teplotní odezvou jsou v naprosté většině případů polymery, zatím bylo publikováno jen velmi málo malých molekul vykazujících LCST. Tyto nové teplotně-citlivé porfyriny by mohly kombinovat zajímavé vlastnosti porfyrinů a polymerů.

Při studiu jejich vlastností bude použita optická mikroskopie doplněná spektroskopii nukleární magnetické rezonance.

### **Teoretický popis struktury polymerních sítí – pravděpodobnostní metody.**

*Vedoucí: Ján Šomvársky, CSc.*

Struktura polymerních sítí má rozhodující vliv na jejich fyzikální a chemické vlastnosti. 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. Kinetická metoda není schopna poskytnout detailní popis struktury gelu (nekonečné molekuly rozprostírající se skrze celý vzorek), proto je nutné ji kombinovat s velmi efektivními pravděpodobnostními metodami (teorie větvcích procesů).

V rámci řešení projektu se student obeznámí s teorií větvcích procesů, konkrétně s Galton-Watsonovým větvcím procesem a jeho aplikací na výpočet strukturních parametrů polymerních sítí. Metodu pak aplikuje na jednoduchý, ale zajímavý případ, např. výstavbu sítě z prekurzorů, tedy ze složitějších jednotek, jejíž vnitřní strukturu je třeba vzít v úvahu.

### **Modelování mechanického chování částicových kompozitů metodou konečných prvků.**

*Vedoucí: Ján Šomvářsky, CSc.*

Částicové kompozity jsou 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, těsnění, ochranné nátěry, zubní materiály nebo tuhé výbušniny. Mechanické vlastnosti kompozitního materiálu závisí na stavu matrice (kaučukovitý nebo skelný), na struktuře polymeru, množství plniva, rozložení a tvaru částic, kvalita adheze, vlastnosti mezivrstvy.

Během řešení projektu se student obeznámí 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. Student vytvoří jednoduchý model kompozitu a bude zkoumat vztahu mezi strukturou polymerní matrice, objemovým zlomkem plniva, distribucí rozmístění a tvaru částic plniva na straně jedné a vlastnostmi kompozitu na straně druhé.

### **Určení teplot fázových přechodů termotropních kapalně-krystalických polymerů pomocí dielektrické spektroskopie**

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

Kapalné krystaly tvoří významnou třídu materiálů, která se nachází mezi krystalickým a izotropním stavem. Zatímco krystaly se vyznačují maximálním translačním a polohovým uspořádáním a minimální pohyblivostí, u kapalin je tomu právě naopak. U kapalných krystalů se oba stavy kombinují a vytváří se u nich tzv. mesomorfní struktury (fáze), u nichž si uspořádání a pohyblivost molekul navzájem konkurují. Pro vznik kapalně krystalického stavu je nutným předpokladem nesymetrický tvar molekul, např. protáhlý (tyčkovitý) nebo plochý (diskovitý) a vzájemný poměr mezi délkou a šířkou molekuly.

U termotropních kapalných krystalů je přechod mezi jednotlivými fázemi určován teplotou. U vysokých teplot (nad teplotou tání) se materiál nachází v kapalném izotropním stavu. Se snižováním teploty se snižuje pohyblivost molekul a materiál se postupně uspořádává od nematické struktury přes strukturu smektickou až po krystalický stav. Nematická struktura je



kapalně-krystalický stav s nejnižším, pouze orientačním stupněm uspořádání. U smektické struktury se k orientačnímu přidává ještě uspořádání polohové, přičemž je stále uvnitř uspořádaných vrstev zachována určitá pohyblivost molekul. Při dalším snižování teploty pak může dojít k vytvoření krystalického stavu.

Jednou z experimentálních metod, kterou lze identifikovat změny pohyblivosti molekul se změnou teploty u kapalně-krystalických látek může být dielektrická spektroskopie. Princip metody spočívá v měření složek komplexní permitivity v širokém frekvenčním a teplotním oboru. Dielektrická spektroskopie je metodou strukturní analýzy polárních látek, tj. látek s permanentním dipólovým momentem. Metoda je proto vhodná právě pro studium kapalně krystalických látek, protože tyto, díky nesymetrickému tvaru molekul, mají většinou výrazný dipólový moment, který se bude měnit se změnou uspořádání.

## Oddělení teoretické fyziky

Navrhované projekty se týkají následujících témat:

- 1) Teoretická analýza Brownova motoru. Dynamika a energetické charakteristiky.**
- 2) Krizové dopravní situace při transportu na molekulárních dálnicích.**
- 3) Bose-Einsteinova kondenzace ve stochastických systémech interagujících částic .**
- 4) Šumem indukované fázové přechody ve fyzice a biologii.**

V případě zájmu budou bližší údaje poskytnuty **prof. RNDr. Petrem Chvostou, CSc.**

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

*Vedoucí: Mgr. Viktor Holubec, PhD.*

Projekt má teoretický charakter. Zabývá se studiem dynamiky a energetiky ve slavném Ehrenfestově urnovém modelu (také známého jako model psů a blech). Tématem projektu 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 projektu je proniknout hlouběji do moderní partie termodynamiky, tzv. termodynamiky malých systémů.

### **Termodynamika Parrondova stroje**

*Vedoucí: Mgr. Viktor Holubec, PhD.*

Projekt má teoretický charakter. 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 projektu je navrhnout a studovat konkrétní fyzikální model, jehož dynamika bude vykazovat vlastnosti Parrondova paradoxu a zkoumat jeho termodynamické charakteristiky.