

Témata studentských projektů 2016/2017

- Depozice tenkých vrstev nízkoteplotní plazmovou tryskou
- Skenovací sondová mikroskopie pro analýzu nanostrukturovaných plazmových polymerů
- Studium vypařování kapek z povrchů o různé smáčivosti
- Automatizace experimentu v plazmatické laboratoři
- Příprava core-shell nanočástic pomocí plynového agregačního zdroje
- Příprava a modifikace nanočástic pomocí tubulárního magnetronu
- Návrh, realizace a testování zařízení pro měření rezistivity vzorků in situ
- Studium hybridního systému křemík – organický polovodič
- Metoda elektrické impedanční tomografie
- Konstrukce aparatury pro měření výstupní práce elektronů v polovodičích v ochranné atmosféře
- Měření pohyblivosti volných nábojů v organických polovodičích
- Měření difúzní délky excitonů v polymerech metodou povrchového fotonapětí
- Teplotně citlivé polymery
- Studium teplotně citlivých molekul pomocí nukleární magnetické rezonance
- Studium polymerního hydrogelu pomocí rozptylu neutronů a X-paprsků
- Kalibrace termočlánků pro sondy nukleární magnetické rezonance (NMR)
- Studium porfyrinů pomocí nukleární magnetické rezonance
- Charakterizace hydrogelů pro použití k orientaci molekul
- Aplikace metody konečných prvků na modelování mechanického chování kompozitů
- Určení teplot fázových přechodů termotropních kapalně-krytalických polymerů pomocí dielektrické spektroskopie
- Energetika v Ehrenfestově modelu a zákon velkých čísel
- Termodynamika Parrondova stroje
- Univerzální vlastnosti zobecněného Ehrenfestova modelu
- Termodynamika molekulárních motorů
- Fázové přechody v nerovnovážných biologických systémech

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

Oddělení fyziky vrstev a povrchů makromolekulárních struktur

Depozice tenkých vrstev nízkoteplotní plazmovou tryskou

Vedoucí: Mgr. Jaroslav Kousal, PhD.

Velké množství aplikací nízkoteplotního plazmatu vyžaduje vakuovou techniku. Proto je věnováno čím dál více pozornosti zdrojům schopným pracovat za atmosférického tlaku. Je to často vhodný prostředek pro povrchovou aktivaci látek, potenciálně též pro aplikace v medicíně nebo dekontaminaci plynů a kapalin.

Zajímavým - a ne zdaleka vyřešeným - problémem je aplikace vysokotlakého plazmatu pro nanášení tenkých vrstev metodou plazmové polymerace.

Cílem projektu je optimalizovat podmínky pro depozici tenkých vrstev z uhlovodíkových prekurzorů (typicky hexan) pomocí plazmových zdrojů, které jsou již na pracovišti k dispozici. Na vrstvách bude sledována jejich morfologie i složení.

Skenovací sondová mikroskopie pro analýzu nanostrukturovaných plazmových polymerů

Vedoucí: Doc. Ing. Andrey Shukurov, PhD.

Povrchová nanostruktura může významným způsobem ovlivňovat funkčnost materiálů. Z tohoto důvodu byly v posledních desetiletích vyvinuty pokročilé metody analýzy povrchů. Jednou z těchto metod je skenovací sondová mikroskopie, např. AFM, která umožňuje sledování topografie povrchu s nanometrovým rozlišením. Práce bude zaměřena na využití této techniky pro analýzu nanostrukturovaných povrchů (nanočástice, nanosloupce, 2D nanostruktury a nanodendrity) připravovaných na KMF MFF UK za využití nízkoteplotního plazmatu. Pro studium připravovaných nanostruktur bude využito zejména nové experimentální zařízení – AFM mikroskop NTEGRA Prima.

Studium vypařování kapek z povrchů o různé smáčivosti

Vedoucí: Doc. RNDr. Ondřej Kylián, PhD.

Vypařování kapek je jedním ze základních jevů odehrávajících se v přírodě. I přes zdánlivou jednoduchost tohoto procesu je dynamika vypařování kapalin zásadní pro nejrůznější aplikace jako je například tisk, čištění povrchů, příprava biosensorů nebo analýza kapalných vzorků. Ukazuje se, že dynamika vypařování závisí nejen na vlastnostech vypařované kapaliny, ale velmi výrazně i na vlastnostech substrátů, ze kterých se kapka vypařuje. Jedním z klíčových parametrů ovlivňujících proces vypařování kapek je smáčivost povrchů. Hlavním cílem tohoto projektu bude určit závislost vývoje kontaktního úhlu vypařujících se kapek z různých typů substrátů a to jak smáčivých, tak i nesmáčivých. Projekt předpokládá zvládnutí metod měření povrchové energie.

Automatizace experimentu v plazmatické laboratoři

Vedoucí: RNDr. Pavel Solař, Ph.D.

Plazma má v současnosti využití alespoň v některé části výroby mnoha produktů. Jedná se jak o opracování existujících povrchů, leptání, nebo depozice zcela nových povrchů a tenkých vrstev, případně nanočástic. K experimentu využívajícím plazma je zapotřebí množství přístrojů, z nichž většina je připojitelná k počítači, což umožňuje zaznamenávat průběžně pracovní podmínky, případně experiment přes počítač řídit. Přístroje komunikují nejčastěji přes sériový port nebo přes analogové rozhraní. Přes sériový port je možné přímo komunikovat s počítačem, pro analogový port je možné použít desku Arduino převádějící analogovou komunikaci na digitální.

Cílem projektu je vytvořit software umožňující jednotlivé přístroje ovládat přes počítač a zaznamenávat provozní podmínky. K řešení je nutná alespoň základní znalost programování (na úrovni základního kurzu v prvním semestru, nejlépe Pascal nebo Delphi). Předpokládá se testování softwaru při provozu, což umožní se alespoň zběžně obeznámit i s experimenty. Přístroje, které je třeba připojit k počítači zahrnují například elektrické zdroje, měrky tlaku, multimetry a další.

Příprava core-shell nanočástic pomocí plynového agregačního zdroje

Vedoucí: Mgr. Jan Hanuš, Ph.D.

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 využít plynový agregační zdroj nanočástic a vzniklé nanočástice následně pokrýt pomocí magnetronového naprašování druhým typem materiálu. V rámci projektu 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. Práce má experimentální charakter.

Příprava a modifikace nanočástic pomocí tubulárního magnetronu

Vedoucí: Mgr. Jan Hanuš, Ph.D.

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 magnetronem, 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. Stejný typ magnetronu 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 projektu budou zkoumány podmínky pro vznik nanočástic v tubulárním magnetronu a bude testována možnost modifikace již připravených nanočástic. Bude zkoumáno prvkové složení nanočástic a jejich optické vlastnosti. Velikost nanočástic bude analyzována pomocí AFM, SEM či HRTEM. Práce má experimentální charakter.

Návrh, realizace a testování zařízení pro měření rezistivity vzorků in situ

Vedoucí: RNDr. Jan Prokeš, CSc.

Měření in situ (doslova měření na místě) podává cenné informace o dynamice sledované charakteristiky v průběhu nějakého děje, podává obraz o změnách sledované veličiny, díky tomu nejsme omezeni pouze na výslednou hodnotu po skončení děje. V tomto projektu půjde o sledování změn rezistivity při růstu vzorku a při jeho degradaci tepelným namáháním.

Cílem tohoto projektu je seznámit se s problematikou takových měření, navrhnout aparaturu (a to zejména tu část, ve které je při měření umístěn vzorek), po výrobě dílů a jejich sestavení danou aparaturu otestovat pomocí kontrolních měření vzorků. O všem podat písemnou informaci formou studentského projektu.

Studium hybridního systému křemík – organický polovodič

Vedoucí: RNDr. Jan Prokeš, CSc.

Studium systémů založených na kombinaci anorganický polovodič – organický polovodič nabízí možnosti kombinovat vlastnosti typické pro jednotlivé složky systému: určitá robustnost a stálost, na druhé straně možnost přípravy velmi tenkých filmů organického materiálu (řádu desítek nm), možnost snadné modifikace těchto filmů, relativní nenáročnost přípravy heterostrukury atd. Ačkoliv jsou takové systémy v literatuře již popsány, není provedené studium nijak rozsáhlé, řada měření zcela chybí.

Cílem tohoto projektu je seznámit se s problematikou hybridního systému křemík – polyanilin, pomocí metod studia voltamperových charakteristik, závislosti kapacity heteropřechodu na napětí apod. tento systém prostudovat, pokusit se změřená data

intepretovat. O získaných výsledcích podat písemnou informaci formou studentského projektu.

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 elektronů v polovodičích v ochranné atmosféře

Vedoucí: Doc. RNDr. Jiří Toušek, CSc.

Měření výstupní práce elektronů umožňuje určit potenciální energii a polohu Fermiho hladiny v pásové struktuře, čímž přináší informaci o koncentraci nábojů v materiálu.

Cíle projektu je zkonstruovat Kelvinovu sondu tak, aby se mohla provozovat v ochranné atmosféře a prověřit její funkci z hlediska citlivosti a reprodukovatelnosti výsledků. Provést několik prvních měření, výsledky porovnat s literaturou.

Měření pohyblivosti volných nábojů v organických polovodičích

Vedoucí: Doc. RNDr. Jiří Toušek, CSc.

Pohyblivost nábojů je jejich rychlost v elektrickém poli o velikosti 1V/cm. Je to parametr, který charakterizuje danou látku a který má zásadní význam pro konstrukci polovodičových součástek. Vyšší pohyblivost nosičů náboje vede i k vyšší účinnosti slunečních článků.

V tomto projektu se pohyblivost měří na organických vrstvách pomocí neohmického kontaktu, který se vytvoří na zkoumané vrstvě. Na kontakt se se vkládá lineárně rostoucí napětí, které v přímém směru náboje injektuje a po přepnutí do závěrného směru je zase odsává. S rostoucí opakovací frekvencí náboje přestávají stačit elektrickému poli, zpožďují se, což se projeví na vysokofrekvenční volt-ampérové charakteristice výrazným lokálním maximem. Z toho potom lze pohyblivost vyhodnotit.

Měření difúzní délky excitonů v polymerech metodou povrchového fotonapětí

Vedoucí: Doc. RNDr. Jana Toušková, CSc.

Difúzní délka excitonů je jedním z nejdůležitějších parametrů ovlivňujících účinnost slunečních článků. Sluneční články na bázi polymerů mají oproti anorganickým článkům (většina je vyráběna z křemíku) výhodu hlavně v poměrně snadné přípravě a nízké ceně. Proto se vývoj v současnosti zaměřuje na zdokonalování struktur s organickými polymery s cílem dosažení požadované účinnosti článků.

Oddělení spektroskopie polymerů

Teplotně citlivé polymery

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 teplotně citlivých molekul pomocí nukleární magnetické rezonance

Vedoucí: Doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.

Tématem projektu bude studium teplotně citlivých molekul v polymerních a supramolekulárních systémech. Zatímco při pokojové teplotě jsou tyto molekuly rozpuštěné, při ohřevu nad tzv. dolní kritickou rozpouštěcí teplotou (lower critical solution temperature, LCST) dochází k fázové separaci. Tento proces je vratný. Při ochlazení pod LCST se vzniklé agregáty opět rozpustí. Materiály s teplotní odezvou jsou v naprosté většině případů polymery, kdy při LCST dochází ke změně konformace řetězců. Zatím bylo publikováno jen velmi málo malých molekul vykazujících LCST. Tyto nové teplotně-citlivé porfyriny kombinují zajímavé vlastnosti porfyrinů a polymerů.

Spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) umožňuje studovat inter- a intramolekulární interakce a dynamiku molekul na mikroskopické úrovni, kdy jsme schopni pozorovat změny v jednotlivých funkčních skupinách molekul. Student se při řešení projektu seznámí se základy a fyzikálními principy NMR spektroskopie a použije ji ke studiu interakce molekul s rozpouštědlem a jejich změn v závislosti na teplotě.

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.

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 porfyrinů pomocí nukleární magnetické rezonance

Vedoucí: RNDr. Hana Kouřilová, Ph.D.

V přírodě mají porfyriny důležitou roli např. ve fotosyntéze, při transportu kyslíku v krvi, nacházejí se ve vitamínu B12. Synteticky připravené porfyriny dokáží mimo jiné detekovat chiralitu molekul, komplexovat s kovovými ionty, s molekulami hosta (interakce host-hostitel), v medicíně jsou využívány k fotodynamické terapii. Tématem projektu bude studium nové třídy porfyrinů, připravených našimi spolupracovníky v National Institute of Material Research v Japonsku, která 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. Tento proces je vratný. Při ochlazení pod LCST se vzniklé agregáty opět rozpustí. Materiály s teplotní odezvou jsou v naprosté většině případů polymery, kdy při LCST dochází ke změně konformace řetězců. Zatím bylo publikováno jen

velmi málo malých molekul vykazujících LCST. Tyto nové teplotně-citlivé porfyriny kombinují zajímavé vlastnosti porfyrinů a polymerů.

Spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) umožňuje studovat inter- a intramolekulární interakce a dynamiku molekul na mikroskopické úrovni, kdy jsme schopni pozorovat změny v jednotlivých funkčních skupinách molekul. Student se při řešení projektu seznámí se základy a fyzikálními principy NMR spektroskopie a použije ji ke studiu interakce porfyrinů s molekulami hosta a jejich změn v závislosti na teplotě.

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, vystředování už nebude úplné a strukturní 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.

Aplikace metody konečných prvků na modelování mechanického chování kompozitů

Vedoucí: Ján Šomvársky, CSc.

Metoda konečných prvků (MKP) je numerická metoda na přibližné řešení parciálních diferenciálních rovnic (PDR) s okrajovými podmínkami. Využívá variační metody. Její princip spočívá v diskretizaci spojitého prostředí do určitého konečného počtu prvků. PDR vznikají při matematickém modelování mnoha fyzikálních, chemických, biologických jevů, např. v materiálových vědách, fluidní dynamice, elektromagnetizmu, astrofyzice, ekonomice, finančním modelování, apod. Student se tedy obeznámí s mocným nástrojem, MKP. Aplikovat jej bude na simulaci rozložení napětí a deformací velmi žádané a zajímavé třídy materiálů: částicových kompozitů.

Částicové kompozity jsou materiály tvořené sesíťovanou 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 plněné hydrogely hlavně v medicíně. Mechanické vlastnosti kompozitního materiálu závisí na stavu matrice (kaučukovitý nebo skelný), na struktuře polymeru, množství plniva, rozložení a tvaru částic, kvalita adheze, vlastnosti mezivrstvy.

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

Energetika v Ehrenfestově modelu a zákon velkých čísel

Vedoucí: RNDr. 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: RNDr. 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.

Univerzální vlastnosti zobecněného Ehrenfestova modelu

Vedoucí: RNDr. Artem Ryabov, PhD.

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

Termodynamika molekulárních motorů

Vedoucí: RNDr. Artem Ryabov, PhD.

Řada životně důležitých biologických procesů uvnitř buněk probíhá díky práci mikroskopických strojů, tzv. molekulárních motorů. 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) 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 budeme studovat stěžejní dynamické a termodynamické charakteristiky, a to buď analytickými, nebo numerickými (Monte Carlo) metodami.

Fázové přechody v nerovnovážných biologických systémech

Vedoucí: RNDr. Artem Ryabov, PhD.

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. V této teoretické práci se zaměříme na studium dynamiky fázových přechodů, které v takových modelech mohou vznikat. Práce bude řešena z části přibližnými analytickými metodami, z části numericky (Monte Carlo simulace).