

Témata disertací pro akademický rok 2016/2017 na PŘF UJEP.

Topics for dissertation thesis for the academic year 2016/2017 at the Faculty of Science UJEP.

1. Metaloorganické sítě pro biologické aplikace Metal-organic frameworks for biological applications

Školitel/supervisor: Ing. Kamil Lang, CSc., DSc.

Ústav anorganické chemie AVČR, Řež

Kontakt/contact: lang@iic.cas.cz

Anotace: Projekt je zaměřen na vývoj nových typů porézních nanočástic a jejich využití pro fotodynamickou terapii a baktericidní, luminescenční a sorpční (nano)materiály. Experimentální práce bude probíhat převážně na Ústavu anorganické chemie AVČR v Řeži. Nanočástice jsou složeny z metaloorganických sítí (metal-organic frameworks, dále nazývané jako MOF), což jsou krystalické koordinační polymery, jejichž organicko-anorganická povaha umožňuje velkou strukturní modularitu. Organizovaná struktura MOFů je výhodou pro přípravu nanočástic obsahujících fotoaktivní spojnice a synergická povaha interakce mezi spojnicemi, sekundárními stavebními jednotkami a molekulami v pórech je základem vývoje nových nanomateriálů.

Annotation: The project aims at the development of new types of porous nanoparticles and their application in photodynamic therapy and for bactericidal, luminescent, and sorption (nano)materials. Experimental work will be predominantly performed at the Institute of Inorganic Chemistry of the CAS in Řež. Nanoparticles are made of metal-organic frameworks (MOFs). MOFs are crystalline materials and their organic-inorganic nature results in a structure modularity, which allows a rational design and synthesis of various topologies. Organized structure of MOFs is advantageous for syntheses of nanoparticles composed of photoactive linkers. Synergistic interactions among linkers, secondary building units, and molecules embedded in pores are bases for the development of new nanomaterials.

2. Funkcionalizace povrchů polymerních substrátů

Surface functionalization of polymeric substrates

Školitel: Doc. Ing. Zdeňka Kolská, Ph.D., PŘF UJEP Ústí nad Labem

Supervisor: Doc. Ing. Zdeňka Kolská, Ph.D., PŘF UJEP Ústí nad Labem

Anotace:

Experimentální práce bude zaměřena na modifikaci povrchů polymerních materiálů fyzikálními a chemickými cestami. Polymerní materiály budou testovány ve formě částic, folií a nanovláken. K aktivaci povrchu bude použito (i) UV záření, (ii) chemická aktivace Piranha roztoky. Bude sledován vliv složení Piranha roztoků, vliv doby expozice a vliv stárnutí vzorků na změnu povrchových vlastností testovaných materiálů. Na aktivované povrchy budou následně roubovány nové chemické vlastnosti s cílem získat materiály se zvýšenou cytocompatibilitou a/nebo zvýšenou antimikrobiální aktivitou.

Testované materiály budou před a po jednotlivých krocích aktivace či chemické modifikace testovány dostupnými technikami. Pro určení smáčivosti bude použita goniometrie, pro studium povrchové chemie a náboje na povrchu budou použity XPS, elektrokinetická analýza, UV-Vis spektroskopie. Dále budou pro studium materiálů použity další dostupné techniky, např. BET analýza pro velikost povrchu, případně XRD, AFM, atd.). Na vybraných studovaných površích budou též probíhat zejména antimikrobiální testy (např. antibakteriální testy nebo testy na inhibici růstu řas, apod.)

Annotation:

Polymer substrates in the form of particles, foils or nanofibers will be activated by physical treatment using UV radiation or by chemical action with Piranha solutions. The effect of exposure time, solution composition and ageing time will be studied. Surface properties of tested materials before and after surface changes will be characterized by available techniques (goniometry, electrokinetic analysis, AFM, XPS, BET surface area, XRD). Also some antimicrobial tests will be realized on tested surfaces.

3. Studium biologických účinků nových typů karbosilanových dendrimerů**The study of biological effects of new types of carbosilane dendrimers**

Školitel/supervizor: RNDr. Jan Malý, PhD, PřF UJEP Ústí nad Labem

Kontakt/contact: malyjalga@seznam.cz

Konzultant: RNDr. Marek Malý, PhD

Anotace/ annotation:

Cílem práce bude studovat vliv typu, generace a povrchových modifikací polymerních nanočástic, tzv. karbosilanových dendrimerů na interakci s modelovými biologickými membránami (lipozómy, sBLM, buněčné membrány), modelovými buněčnými kulturami a vybranými biomakromolekulami (peptidy, nukleové kyseliny). Ke studiu budou využity dendrimery připravené v laboratořích spolupracujících partnerů (v ČR tak i v zahraničí) s potenciálem jejich biomedicínského využití např. v oblasti cílené dopravy léčiv či diagnostiky. Předpokládá se využití zejména biofyzikálních metod (např. spektro-

fluorimetrie, mikroskopie atomárních sil, dynamický rozptyl světla, stanovení elektrokinetického potenciálu, elektroforéza atp.) a provádění experimentů na modelových buněčných liniích (studium cytotoxicity a transfekce, využití průtokové cytometrie, fluorescenční mikroskopie atp.). Tyto techniky jsou dostupné na pracovišti UJEP. V rámci studia se předpokládá zahraniční stáž na některém ze spolupracujících pracovišť. Práce je finančně podpořena řešeným projektem GAČR.

Annotation: The aim of this project is to study the effect of type, generation and surface modification of carbosilane dendrimeric nanoparticles on interaction with model biological membranes (liposomes, sBLM, cell membranes) and the selected cell cultures biomacromolecules (peptides, nucleic acids). Materials will be prepared with regard to their potential biomedical uses, i.e. in targeted drug delivery and diagnostics and characterized by biophysical methods (e.g. fluorimetry spectroscopy, atomic force microscopy, fluorescence microscopy, dynamic light scattering, the determination of the electro-kinetic potential, electrophoresis) and by cytotoxicity, transfection studies, flow cytometry, etc

4. Nové luminiscentní makro-polyedrální nanostruktury na bázi hydridů bóru.

New Luminescent Macropolyhedral Boron Hydrides

Školitel/supervizor: Dr. Michael Londesborough ÚACH AV ČR Řež u Prahy
Kontakt/contact: Michael@iic.cas.cz

Anotace:

Cílem projektu je design řady nových luminiscentních nanomateriálů na bázi hydridů bóru a jejich derivátů v různých formách (tenké vrstvy, nanokompozity...). Práce bude zahrnovat syntézu nanomateriálů a jejich charakterizaci, včetně teoretických výpočetních studií. Cílem práce je zvýšení výkonnosti boranových laserů a design nových typů laditelných laserů.

Annotation: This project will generate a portfolio of new luminescent borane molecules, polymers and films synthetically designed (on the basis of experimental observations and computational analyses) to increase the laser efficiency of borane materials, thus making them a novel and competitive alternative to the present conjugated carbon-based laser dyes as the active medium for widely tunable laser sources.

5. Studium krystalických materiálů obsahujících nano-částice metodou RBS-channeling

Study of crystalline materials containing nano-particles using RBS-channeling

Školitel/Supervisor: Doc. RNDr. Anna Macková, PhD. (ÚJF AV ČR)
Kontakt/contact: tel: 266172102, fax: 220940141, e-mail: mackova@ujf.cas.cz

Anotace/Annotation: Příprava nano-struktur metodou iontové implantace je v současné době velmi používaná technologie. Implantace iontů vzácných zemin do krystalických materiálů je progresivní způsob, jak vytvořit materiály s význačnými optickými a luminiscenčními vlastnostmi. Aplikace těchto materiálů ve fotonice a spintronice je velmi perspektivní. Analytická metoda RBS – channeling je založena na kanálování nabitých částic v periodickém potenciálu krystalické mřížky, kdy částice prochází mnoha rozptyly pod malými úhly a pohybuje se tak, že výtěžek ve spektru zpětně odražených iontů prudce klesá. Skenováním výtěžku rozptylu v závislosti na úhlu vzhledem k axiální ose kanálu získáme informace o polohách atomů v intersticiálních polohách a přítomnosti defektů v krystalu. Úkolem doktorské práce bude příprava nano-struktur metodou iontové implantace, charakterizace připravených nano-struktur metodami RBS, RBS – channeling a simulace výtěžku iontů podél jednotlivých krystalografických orientací s aplikací na strukturní analýzu těchto materiálů. Na výše zmíněné problematice spolupracujeme s pracovišti VŠCHT Praha, Helmholtz Zentrum Dresden-Rossendorf a Physical-Technical Institute, Kazan, kde se předpokládají stáže doktoranda.

Annotation: Nano-structure deposition using ion implantation technique is very promising technology nowadays. Rare earth ion implantation into crystalline materials serves as a progressive way to develop new materials with the extraordinary optical and luminescent properties. RBS channeling analytical method is based on the charged particle channeling in the periodic potential of crystalline atom rows. The penetrating ion beam is focused in the forward direction and the back-scattering probability decreases significantly, thus the yield of the back-scattered ions in the spectra is descending function of the incoming beam angle. Following the back-scattered ion yield in dependence to the incoming angle of ions gives us information about the impurity atoms positions, disordered atoms in the interstitial positions etc. The main goal of the proposed work will be the preparation of the nano-structures by means of the ion implantation, characterization of the prepared nano-structures by RBS and RBS channeling and the simulation of ion yields according to the different crystallographic orientations.

6. Simulace axiálního kanálování v krystalických materiálech a srovnání s experimentálními daty získanými metodami RBS-channeling and PIXE channeling

Axial ion channeling simulation in crystalline materials comparing to experimental data obtained from RBS channeling and PIXE channeling

Školitel/Supervisor: Doc. RNDr. Anna Macková, PhD. (ÚJF AV ČR)

Kontakt/contact: tel: 266172102, fax: 220940141, e-mail: mackova@ujf.cas.cz

Anotace/annotation: Analytická metoda Rutherford Backscattering Spectrometry – channeling (RBS-channeling) je založena na kanálování nabitých částic v periodickém potenciálu krystalické mřížky, kdy částice prochází mnoha rozptyly pod malými úhly a pohybuje se tak, že výtěžek ve spektru zpětně odražených iontů prudce klesá. Skenováním výtěžku rozptylu v závislosti na úhlu vzhledem k axiální ose kanálu získáme informace o polohách atomů v intersticiálních polohách a přítomnosti defektů v krystalu. Pro přesnou interpretaci kanálovacích měření je nezbytné použít simulaci metodou MC (Monte Carlo) založené na aproximaci procesu binárními kolizemi a se započítáním pravděpodobnosti nejbližšího přiblížení částice k rozptylovému centru. Úkolem doktorské práce bude na základě známých a používaných rutin případně existujících programů (FLUX) provádět MC simulace iontového toku, rozdělení hybností a energií iontů podle jednotlivých

krystalografických orientací zkoumaných krystalů, generování spekter zpětně odražených iontů v kanálovacím směru pro specifické krystalografické orientace, simulace závislosti výtěžku zpětně odražených iontů na úhlu dopadu iontového svazku (tzv. angulární skeny), polohování dopantů dle tvaru angulárního skenu pro jednotlivé krystalografické orientace v krystalické mřížce zkoumaného materiálu [5-9]. Výsledky simulací budou používány pro interpretaci již získaných dat.

Annotation: RBS channeling analytical method is based on the charged particle channeling in the periodic potential of crystalline atom rows. The penetrating ion beam is focused to the forward direction and the back-scattering probability decreases significantly, thus the yield of the back-scattered ions in the spectra is a descending function of the incoming ion beam angle. Following the back-scattered ion yield in dependence to the incoming angle of ions gives us information about the impurity atoms positions, disordered atoms in the interstitials positions etc. Precise information about the investigated structural changes can't be provided without the MC simulation, where the binary collisions approximation with the close encounter probability calculation is used. FLUX is a batch of routines, which enables to simulate ion flux, ion momentum and energy for the various crystallographic orientations, enables to generate the spectrum of back-scattered ions in dependence of the incoming ion beam angle (angular scans). Using above mentioned features the positioning of dopants in the crystalline materials can be done. The simulations will be realized for the real data obtained from our previous research.

7. Funkční nanomateriály pro optiku, fotoniku a spintroniku připravených metodou iontové implantace

Functional nanomaterials for optics, photonics and spintronics prepared by ion implantation

Školitel/Supervisor: Doc. RNDr. Anna Macková, PhD. (ÚJF AV ČR)

Kontakt/contact: tel: 266172102, fax: 220940141, e-mail: mackova@ujf.cas.cz

Anotace/annotation: Předmětem doktorské práce je výzkum nových materiálů pro optiku a elektroniku založených na iontové modifikaci a dopaci různých uhlíkových struktur. Sledovány budou nové způsoby dotace těchto struktur z hlediska modifikace materiálu, strukturálních změn a následných elektrických a optických vlastností. Cílem bude i příprava tenkých polymerních, opticky aktivních organických vrstev, charakterizace uhlíkových alotropů po ozáření energetickými ionty. U připravených materiálů bude sledován vliv koncentrace a distribuce dopantů na optické a elektrické vlastnosti. Pro nedestruktivní analýzy připravených vrstev bude použita metoda Rutherfordova zpětného rozptylu iontů (RBS) s dalšími jadernými analytickými metodami (ERDA, PIXE).

Annotation: The main goal of this work will be the study of new, progressive materials for optical applications based on carbon structures. The structural changes, new doping technologies will be used to modify the carbon based structure to get the new optical and electrical properties. The important task will be the preparation of the thin polymeric or carbon based optical active structures. In the prepared structures will be studied the structural changes, compositional changes and dopant profiles using nuclear analytical methods (RBS, ERDA and PIXE) and the consequences of above mentioned to the electrical and optical properties.

8. Využití iontové mikrosondy k analýzám a modifikacím materiálů

Ion microprobe application on characterization and modification of materials

Školitel/Supervisor: Doc. RNDr. Anna Macková, PhD. (ÚJF AV ČR)

Kontakt/contact: tel: 266172102, fax: 220940141, e-mail: mackova@ujf.cas.cz

Anotace/annotation: Jaderné analytické metody na svazcích urychlených iontů mají široké využití při analýzách vzorků tenkých povrchových vrstev, vzorků atmosférických aerosolů, archeologických vzorků, biologických a geologických vzorků a v řadě dalších oblastí. V iontové mikrosondě je svazek urychlených iontů dále fokusován speciální iontovou optikou na velikost menší než 1 mikron. Iontový mikrosvazek nabízí jedinečnou možnost laterálního skenování vzorku a provádění kvalitativní a kvantitativní analýzy metodami RBS (Rutherford Backscattering Spektroskopie), PIXE (Particle Induced X-ray Emission), PIGE (Particle Induced Gamma-ray Emission) a STIM (Scanning Transmission Ion Microscopy) s rozlišením menším než 1 mikron. Doktorand se bude podílet na rozvoji a implementaci jaderných analytických metod v podmínkách simultánních analýz na širokém svazku i na iontové mikrosondě. Dále se bude zabývat aplikacemi iontové mikrosondy pro modifikaci a analýzu materiálů, rozvojem softwaru pro prvkové mapování s využitím mikrosondy.

Annotation: Nuclear analytical methods have very broad field of applications as the characterization of thin layers, aerosols, archaeological artefacts, biological and geological science application. Ion microprobe is a beam of energetic ions which is focused using special ion optics to the 1 micrometer dimension. Ion microprobe enables us to provide a lateral scanning and to realize a qualitative and quantitative analysis by RBS (Rutherford Backscattering Spectroscopy), PIXE (Particle Induced X-ray Emission), PIGE (Particle Induced Gamma-ray Emission) and STIM (Scanning Transmission Ion Microscopy) with lateral resolution better than 1 micron. The main goal of this work will be the development and implementation of nuclear analytical methods under the condition of the simultaneous analysis using either broad or focused ion beam. Further will be work focused on the modification of materials using focused heavy ion beam (Ion Beam Writing) and software development for this task.

9. Analýza mikroobjektů pomocí metody FIB-SEM-EDS-WDS

Analysis of microobjects using FIB-SEM-EDS-WDS

Školitel/Supervisor: RNDr. Jan Lorinčík, PhD. (Centrum výzkumu Řež, s.r.o.)

Kontakt/contact: e-mail: jan.lorincik@cvrez.cz

Anotace/annotation: V rámci dizertace se doktorand(ka) seznámí s problematikou interakce elektronů s pevnou látkou a inovativní metodou rastrovací elektronové (SEM) kombinovanou s iontový dělem typu FIB a detektory rentgenovského záření typu EDS a WDS. Důležitou součástí práce bude Monte Carlo modelování interakce elektronů s povrchem pevné látky. Cílem práce je nalezení a ověření nových analytických postupů pro prvkovou analýzu mikrometrových a sub-mikrometrových objektů, např. prachových částic. K dispozici pro práci bude přístroj typu FIB-SEM (rastrovací elektronový mikroskop a galiovým iontovým svazkem) dále vybavený GIS (systém vstřikování plynů), EDS (Energy

Dispersive Spectrometer), WDS (Wave Dispersive Spectrometer), EBSD (Electron Backscattered Diffraction) a nanomanipulátorem.

Annotation: During the PhD study the student will learn about the electron-solid interaction and about an innovative technique of Scanning Electron Microscopy (SEM) combined with FIB and EDS and WDS. An important part of the PhD work will be a Monte Carlo modelling of electron -solid interaction. The goal of the work is the finding and verification of new analytical procedures for elemental analysis of micrometric and sub-micrometric objects, e.g. dust particles. The following instrumentation is available for the study: a FIB-SEM (scanning electron microscope with a Ga ion beam) equipped with GIS (Gas Injection System), EDS, WDS, EBSD and a nanomanipulator.

10. Difrakční analýza nanovlákných textilií

Diffraction analysis of nanofiber textile

Školitel/Supervisor: Prof. RNDr. Pavla Čapková, DrSc, PřF UJEP

Kontakt/contact: e-mail: Pavla.Capkova@ujep.cz

Anotace/Annotation:

Výzkum bude zaměřen na strukturní charakterizaci nanovlákných textilií a pochopení vztahů struktura – vlastnosti nanovlákných antimikrobiálních filtračních medií. Protože struktura spoluurčuje fyzikální i chemické vlastnosti nanovláken, důraz bude kladen na rozvoj metodiky difrakční analýzy nanovlákných textilií, která klade specifické nároky na techniku difrakce i analýzu dat. Jedná se o polymerní tenké vrstvy, částečně krystalické se silným podílem amorfni fáze, se silnou texturou a v případě polyamidových vláken i se dvěma typy krystalové fáze. Cílem práce bude nalézt vztahy mezi technologickými parametry, strukturou, vlastnostmi a funkcí nanovlákných filtrů.

Annotation:

Research will focus on the structural characterization of nanofiber textiles and understanding the relationship: structure - properties of nanofiber filtration media. Because the structure determines the physical and chemical properties of nanofibers, the emphasis will be put on developing the methodology of diffraction analysis of nanofiber textiles, which is quite specific in case of nanofiber textile. Nanofiber textile is a specific a polymeric thin film, partially crystalline with a strong proportion of amorphous phase, with strong texture and in the case of polyamide fibers also with two types of crystalline phase. The goal will be to find the relationship between technological parameters, structure, properties and functions of nanofiber filters.

11. Výzkum moderních materiálů na bázi oxidů pomocí elektronových spektroskopí

Research of novel oxide based materials by electron spectroscopies

Školitel: doc. Ing. Martin Kormunda, Ph.D.

Kontakt/ contact: martin.kormunda@ujep.cz

Anotace: Oxidy jsou materiály se zajímavými vlastnostmi se širokým využitím od elektroniky, optiky přes katalýzu a rozklad organických látek. Vlastnosti oxidů výrazně ovlivňují metody přípravy a zejména vzájemné vazby jednotlivých prvků. Cílem práce bude výzkum možností analýzy oxidů kovů různých forem, vrstvy i prášky pomocí elektronových spektroskopí. A také vysvětlení korelací elektronických vlastností s funkčními vlastnostmi.

Annotation: Oxides are interesting materials with properties applicable in electronics, optics, and chemistry of catalysis or decompose of organics. Their properties are strongly influenced by preparations techniques and mainly by interactions between elements. The study will be focused on possibilities of analyses the oxides of various forms (films, powders, etc.) by electron spectroscopies. The correlations between functional properties and electronic states will be found.

12. Magnetronové naprašování vrstev oxidů pro optické aplikace a senzory

Magnetron deposition of oxide coatings for optical applications and sensors

Školitel: doc. Ing. Martin Kormunda, Ph.D.

Kontakt/ contact: martin.kormunda@ujep.cz

Anotace: Magnetronové naprašování je univerzální technika pro vytváření tenkých vrstev. V rámci výzkumu budou studovány zajímavé vlastnosti multivrstev a budou porovnány s vlastnosti gradientních vrstev, pro které bude upraven depoziční system (jeden z hlavních úkolů). Vrstvy budou založeny na oxidech kovů. Budou využívány různé plazmové zdroje s napájením DC, RF a pulzním s a bez ICP ionizace and předpětí na substrátu. Mělo by být možné povlakovat i nerovinné prvky. Vytvořené vrstvy budou charakterizovány širokou paletou technik např. SIMS, SEM, TEM, XPS, AES, FTIR, ellipsometry, atd.

Annotation: Magnetron sputtering is versatile technique for thin films deposition. The interesting properties of multicoating systems will be studies and they will be compared to gradient coatings for mainly optical systems. The coatings will be based on metal oxides. To develop a system for gradient coatings depositions will be one of the main topics. The various sputtering sources will be used in DC, RF, pulsed configurations with and without ICP coils and bias substrate. The non-flat substrates uniform coverage should be reached. The coatings will be characterized by multiple techniques (SIMS, SEM, TEM, XPS, AES, FTIR, ellipsometry, etc.).