

Témata disertačních prací studijního programu Fyzikální chemie pro rok 2021

Název: Interakce tenkých porézních polovodivých vrstev s atmosférickým plasmatem

Školitel: [Dzik Petr, doc. Ing., Ph.D.](#)

Polovodivé materiály hrají klíčovou roli ve fotokatalytických a elektrofotokatalytických procesech a v poslední době si razí cestu k úspěšným aplikacím v fotonických zařízeních zhotovených materiálovým tiskem. Pro tuto výrobní technologii je nanejvýše výhodné, pokud se fixace vrstvy provede tzv. studeným procesem, tedy bez ohřevu na teploty vyšší než cca 150 °C. Takový výrobní postup umožňuje potom masovou výrobu v režimu roll-to-roll na polymerní substráty. Opracování atmosférickou plasmou je velmi slibnou možností, jak takového studené fixace dosáhnout. Práce se proto bude věnovat detailnímu studiu procesů probíhajících v tenkých porézních vrstvách polovodičů při interakci s atmosférickým plasmatem s aplikačním výhledem do oblasti tištěné elektroniky.

Název: Studium samočisticích vlastností fotoaktivních vrstev

Školitel: [Dzik Petr, doc. Ing., Ph.D.](#)

Předmětem studia je příprava fotoaktivních vrstev, jak na bázi anorganických polovodičů, tak i organických fotoaktivních materiálů. Cílem dizertace je nalézt vhodné metody testování jejich účinnosti během jejich nasazení, resp. použití. Metody testování musí umožnit testování na vodorovných i svislých površích, na hladkých i drsných.

Spolehlivost a použitelnost metod pro mnohé povrchy bude hlavním cílem.

Název: Plazmochemická povrchová úprava nano a mikro materiálů

Školitel: [Kozáková Zdenka, doc. Ing., Ph.D.](#)

Cílem disertační práce je povrchová úprava nano a mikro materiálů pro technologické aplikace, zejména pak pro zemědělství, s cílem zlepšit dispergaci těchto materiálů ve vodném prostředí. Hlavní důraz bude kladen na využití elektrických výbojů v kapalinách nebo interagujících s kapalinami, výboje v plynné fázi budou využity jen okrajově. Kromě charakterizace vlastního plazmatu a účinnosti úpravy pro tvorbu homogenních koloidních roztoků bude využito i široké spektrum materiálových analýz za účelem pochopení plazmatem iniciovaných procesů s ohledem na optimalizaci procesů.

Název: Organické funkční materiály s pokročilými optickými vlastnostmi

Školitel: [Vala Martin, doc. Mgr., Ph.D.](#)

Práce je zaměřena na studium vztahu mezi molekulární strukturou a netriviálními optickými vlastnostmi jako je štěpení singletů (tzv. singlet-fission), multi-fotonová absorpce apod. Vlastnosti molekul budou studovány pomocí charakterizace absorpce, kvantového výtěžku a doby života

fluorescence, vyhasínacích křivek časově rozlišené fluorescence a dále pak určováním multi-fotonového absorpčního průřezu a spekter. Bude využito jak ustálené optické spektroskopie, tak časově rozlišených optických metod. Během studia bude využívána unikátní aparatura pro charakterizaci fluorescence v magnetickém poli a laserová aparatura. Téma je řešeno v rámci výzkumného projektu financovaného Grantovou agenturou ČR.

Název: Analýza produktů dielektrického bariérového výboje hořícího ve směsích dusíku s organickými sloučeninami

Školitel: [Mazánková Věra, doc. Mgr., Ph.D.](#)

Obsahem doktorské práce bude analýza plyných produktů dielektrického bariérového výboje, který hoří ve směsi dusíku a vhodně zvolených organických látek za atmosférického tlaku. Pro analýzu produktů výboje budou použity metody GC-MS, FTIR, OES a PTR-MS. Použité organické látky budou zejména monomery používané pro depozice tenkých tvrdých či polymerních vrstev. Cílem práce je indentifikovat vznikající fragmenty organické látky a případně jejich vzájemné chemické reakce.

Název: Studium vlivu plazmatem aktivované vody na organické složky půd

Školitel: [Krčma František, doc. RNDr., Ph.D.](#)

V posledních letech se do popředí zájmu zemědělské praxe dostávají environmentálně přijatelné metody a prostředky hospodaření. Jednou z cest je i využití plazmatem aktivované vody. Ve vodě vystavené plazmatu jsou totiž přítomny v závislosti na podmínkách přípravy nejen oxidativní částice (zejména peroxid vodíku), ale i částice vykazující antibakteriální a fungicidní účinky (kromě peroxidu vodíku zejména peroxynitrid). Navíc lze ve vodě generovat i dusičnany a dusitany, které mohou být jako hnojivo aplikované formou postřiku na listy. Část aplikovaného postřiku však vždy končí v půdě, a dosud není jasné, do jaké míry dochází vlivem této aplikace ke změnám půdních vlastností, zejména pak ke změnám ve složení a chování organické půdní hmoty. Práce bude zaměřena na detailní studium vlivu plazmatem aktivované vody na různé půdy se zaměřením na půdní organické látky a mikroorganismy. Ke studiu bude využito dostupných technik jak na pracovišti, tak v rámci spolupráce v Akci COST CA19110 na dalších evropských pracovištích. Práce bude průběžně konzultována s pedology z Mendelovy univerzity v Brně.

Název: Studium chemických procesů iniciovaných elektrickými výboji v mimozemských atmosférách

Školitel: [Krčma František, doc. RNDr., Ph.D.](#)

Cílem práce je studium chemických procesů iniciovaných elektrickými výboji v plyných směsích odpovídajících mimozemským atmosférám. K analýze plazmatu bude využito optické emisní spektrometrie, chemické analýzy produktů výbojů budou realizovány zejména pomocí in situ hmotnostní spektrometrie s reaktivní ionizací.

Název: Aplikace plazmatu v konzervátorství

Školitel: [Krčma František, doc. RNDr., Ph.D.](#)

Cílem doktorské práce je studium aplikací plazmatu generovaného za sníženého i atmosférického tlaku v plynech a kapalinách pro odstraňování korozních vrstev z archeologických předmětů. Vzorky pro vlastní práci budou připravovány různými postupy tak, aby bylo možné porovnávat účinnost procesu na různé typy koroze. Součástí práce bude i diagnostika používaného plazmatu a v případě použití kapalin i diagnostika jejich základních vlastností. K materiálovým analýzám bude využito nejrozličnějších technik materiálových analýz, především pak SEM/EDX, XRD, FTIR a LA-MS.

Název: Tištěný chemický kód

Školitel: [Veselý Michal, prof. Ing., CSc.](#)

Předmětem studia je sestavení chemického kódu, čitelného minimálně v 256 variantách. Chemický kód musí být neviditelný na světle i v UV světle, čitelný pouze spektrálními metodami. Cílem dizertace je takový kód sestavit, prověřit spektrální překryvy se složkami papíru a vybraných materiálů, na které bude chemický kód aplikovaný. Předpokládá se použití rentgenové fluorescenční spektroskopie. Vyloučení spektrálních interakcí složek, vysoký počet kombinací chemického kódu a automatizace zpracování naměřených dat do kódové podoby budou hlavní cíle dizertace.

Název: Tištěné indikátory stavu atmosféry v obalech potravin

Školitel: [Veselý Michal, prof. Ing., CSc.](#)

Předmětem studia je příprava a kalibrace indikátorů stavu atmosféry v balení potravin. Jedná se o indikátor kyslíku, koncentrace CO₂, pH prostředí, specifické reakce na přítomnost amoniaku i biogenních aminů. Cílem dizertace je tedy prostudovat dostupnou literaturu, navrhnout tyto indikátory, připravit je tiskem a kalibrovat pro zvolenou hraniční koncentraci příslušného analytu. Důraz je kladen na zdravotní nezávadnost použitých polymerů a dalších látek.

Název: Nerovnovážná termodynamika a teorie chemické kinetiky

Školitel: [Pekař Miloslav, prof. Ing., CSc.](#)

Výsledky získané v oblasti makroskopické nerovnovážné termodynamiky ukazují, že mezi chemickou termodynamikou a kinetikou jsou těsnější vztahy, než se obvykle uvádí. Termodynamika vymezuje obecný rámec určující mimo jiné i tvar rychlostních rovnic a klade omezení na koeficienty těchto rovnic. Související teorie byla dosud rozpracována jen pro tzv. lineární tekutiny, kde stále zůstává k vyjasnění několik zajímavých otázek. Dizertace by se postupně zaměřila na následující problémy této oblasti:

- kinetika ve směsích neideálních tekutin, použitelnost aktivity v kinetických rovnicích;
- aplikace termodynamické teorie na reakční mechanismy s aktivovaným komplexem, studium souvislostí s mikroskopickou teorií (aktivovaného komplexu) a předchozím problémem;
- aplikace teorie na vybrané publikované mechanismy, srovnání získaných kinetických rovnic s publikovanými a diskuse přínosu nové teorie pro kinetickou praxi;
- rozšíření teorie mimo oblast lineárních tekutin, zejména se zaměřením na reagující systémy s významným vlivem difúze a na vztah rychlost reakce-difúze.

Název: Studium vlastností tranzistorů na bázi iontových kapalin

Školitel: [prof. Ing. Oldřich Zmeškal, CSc.](#)

Práce se bude zabývat přípravou tranzistorů s iontovými kapalinami. Budou studovány optické, elektrické a dielektrické vlastnosti tenkovrstvých struktur připravených s různými iontovými kapalinami.

Název: Studium tepelných vlastností objemových materiálů

Školitel: [prof. Ing. Oldřich Zmeškal, CSc.](#)

Práce bude zaměřena na studium tepelných vlastností materiálů využívaných k akumulaci tepla založené na změně skupenství látek. Experimentální část bude zaměřena na měření akumulovaného tepla v různých látkách pomocí plošných a bodových teplotních snímačů (termočlánek, termokamera). Při práci bude využita nová metoda vycházející z teplotních měření odezev na puls nebo skok dodaného tepla umožňující komplexní hodnocení vlastností uvedených látek. K měření absorpčních a emisních vlastností uvedených PCM materiálů bude využita termokamera. Ke zpracování dat budou využity metody obrazové analýzy.