

Témata disertačních prací studijního programu Fyzikální chemie pro rok 2022

Název: Pokročilé materiály pro organickou fotoniku

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

Pokročilé organické materiály představují velmi zajímavou alternativu k tradičním anorganickým látkám využívaných ve fotonických aplikacích. Organické materiály poskytují celou řadu potenciálních výhod jako je flexibilita, nízká hmotnost, příprava nízkonákladovými technikami materiálového tisku, široké možnosti ladění parametrů, malou environmetální zátěž apod.

Tato práce se bude zabývat studiem vztahu mezi (zejména) optickými vlastnostmi a chemickou strukturou organických pi-konjugovaných látek (barviva, pigmenty). Jednou z cílových aplikací budou organické pevnolátkové lasery. Součástí práce tedy bude příprava a studium takovýchto modelových struktur. Studovány budou zejména vlastnosti související se zářivými a nezářivými procesy po fotoexcitaci. Mezi typické metody studia bude patřit absorpční a fluorescenční spektroskopie, určování doby života a kvantových výtěžků fluorescence a stanovování prahové excitační energie pro vyvolání zesílené spontánní emise (ASE) a dalších parametrů ovlivňujících jejich funkci.

Práce bude probíhat v rámci Laboratoře organické elektroniky a fotoniky (<https://www.fch.vut.cz/vav/cmvlaboratore/elektro>) na Centru materiálového výzkumu na Fakultě chemické VUT v Brně. V rámci tohoto týmu máme více než 20 leté zkušenosti v tomto oboru doložené téměř 200 publikacemi citovanými více než 1000 krát.

FCH VUT je hrdým držitelem prestižního ocenění HR Excellence in Research Award udělovaného Evropskou komisí <https://www.vut.cz/vut/hr-award>).

FCH VUT is a proud holder of the HR Excellence in Research Award by the European Commission (<https://www.vut.cz/en/but/hr-award>).

Název: Fluorescenční spektroskopie ve studiu vlastností asociativních koloidních systémů

Školitel: [doc. Ing. Filip Mravec, Ph.D.](#)

Tato práce je zaměřená na využití stacionárních, časově rozlišených a mikroskopických fluorescenčních technik ve výzkumu fyzikálních vlastností asociativních koloidů. Takto získané informace budou korelovány s technologickými parametry asociativních koloidů, jako jsou solubilizace a solubilizační kapacita, stabilita, distribuce velikostí apod. V rámci studia budou získány nejen dovednosti v různých technikách fluorescenční spektroskopie, ale i v komparativních technikách jako jsou například techniky rozptylu světla.

Název: Studium bioakumulace vybraných kontaminantů v rostlinách metodou spektroskopie laserem buzeného plazmatu

Školitel: doc. Ing. Pavel Pořízka, Ph.D.

V současné době dochází k velkému rozvoji nanomateriálů, které nachází využití v průmyslu. S jejich masovým využitím se zvyšuje riziko průniku do životního prostředí, a proto je nutné monitorovat jejich vliv na různé ekosystémy. Spektroskopie laserem buzeného plazmatu (LIBS) je optická emisní metoda vhodná mimo jiné pro prvkové mapování povrchu velkých vzorků. Informace o biodistribuci a bioakumulaci materiálu v organismu je velmi důležitá pro správné vyhodnocení jeho toxického efektu. Metoda LIBS dokáže s dostatečným rozlišením detekovat kontaminanty v rostlinách. Cílem této práce je stanovení bioakumulace a translokace vybraných nanomateriálů v rostlinách a studium vlivu plazmatem aktivované vody na bioakumulaci.

Název: Bio-aplikace plazmatem aktivované vody

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

Interakcí plazmatu s vodou vzniká tzv. plazmatem aktivovaná voda, která má odlišné fyzikální vlastnosti i chemické složení. Způsobuje to především zvýšená produkce reaktivních částic kyslíku a dusíku, a to v závislosti na způsobu přípravy plazmatem aktivované vody. Díky vysokému oxidačnímu a sterilizačnímu potenciálu je plazmatem aktivovaná voda současným žhavým tématem jak v biomedicíně, tak v zemědělství, kde se navíc díky zvýšenému obsahu dusíkatých částic uplatňuje i jako alternativní způsob hnojení. Vlastní práce se bude zabývat aplikací plazmatem aktivované vody na vybrané mikroorganismy a plísňe s cílem vyhodnotit efektivitu využití tohoto média v humánní i veterinární medicíně, případně v zemědělství.

Název: Indikátory pro inteligentní obaly

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

Téma je soustředěno na studium indikátorů/sensorů plynů jako součást inteligentního obalu, který umí spotřebiteli oznámit překročení kritické koncentrace plynů v obalu. Jedná se o indikátory plynů uvolňovaných v balení potravin při jejich kažení, jako jsou amoniak, sirovodík, merkaptany a jiné. Dále indikátory stavu atmosféry obalu, typicky indikátor kyslíku v atmosféře oxidu uhličitého nebo kyslíku ve vakuovaných obalech. Předmětem dizertace bude příprava indikátorů, studium jejich vlastností a jejich kalibrace. Předpokládá se příprava tištěného indikátoru s vizuálně hodnotitelnou barevnou změnou nebo i se změnou fluorescence.

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 tepelných vlastností materiálů akumulujících teplo na bázi fázové přeměny

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.

Název: Studium tepelných vlastností objemových materiálů

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

Práce bude zaměřena na studium tepelných vlastností objemových materiálů vpřipravených 3D tiskem. Experimentální část bude zaměřena na měření vlastností materiálů s příměsemi (pigmenty, barviva, kovy) 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.

Název: Využití přímé aplikace plazmatu pro terapeutické účely

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

Práce se bude zaměřovat na přímé terapeutické využití nízkoteplotního nerovnovážného plazmatu pro sterilizaci a podporu hojení ran. Předpokládají se především experimenty in vitro, ve spolupráci s Veterinární univerzitou pak i ověřovací experimentální práce s patogenními organismy in vitro i in vivo. Práce bude koordinována v rámci Akce COST CA20114.