

Studijní program: Nanotechnologie (navazující magisterský)

Studijní obor: Aplikované nanotechnologie

Fyzika a chemie nanomateriálů

Kvantová fyzika a chemie

Základní experimentální východiska kvantové mechaniky. Korpuskulárně-vlnový dualismus.

Matematický aparát kvantové mechaniky – lineární hermitovské operátory, operace s operátory, vlastní funkce a spektrum vlastních hodnot operátoru.

Postuláty kvantové mechaniky. Komutativnost operátorů, společné vlastní funkce, relace neurčitosti.

Stacionární stavy. Schrödingerova rovnice a její řešení pro jednodušší jednorozměrné problémy (potenciálová bariéra a tunelový jev, potenciálová krabice; lineární harmonický oscilátor, porovnání řešení pro klasický a kvantový oscilátor].

Moment hybnosti a jeho vlastní hodnoty a funkce. Schrödingerův model atomu vodíku - spektrum energie, radiální a azimutální rozložení hustoty pravděpodobnosti. Spin. Štěpení energetických hladin atomu vodíku ve vnějším homogenním magnetickém poli (Zeemanův jev).

Vícečásticové systémy, nerozlišitelné částice, Pauliho vylučovací princip. Mnohaelektronové atomy (spin-orbitální interakce, elektronové konfigurace a periodická soustava prvků, celkový moment hybnosti, LS-vazba, jj-vazba).

Atomová spektra (vznik spektrálních čar, výběrová pravidla, jednoelektronová a dvouelektronová spektra).

Chemická vazba (vznik molekul, sdílení elektronů, metoda LCAO, iontová vazba), struktura molekul.

Molekulová spektra - rotační spektra (základní představy: rotační energetické hladiny pro dvouatomové molekuly a víceatomové molekuly představující symetrický setrvačnick, vznik rotačních spekter, výběrová pravidla a pravděpodobnost přechodů); vibračně rotační spektra (vibrační energetické hladiny dvouatomové a víceatomové molekuly, vibračně rotační spektra); elektronová spektra.

Anorganická a organická a makromolekulární chemie

Základy teorie chemické vazby

Atomové jádro, elektronový obal atomu, atomové orbitály, kvantová čísla, výstavbový princip. Elektronová konfigurace atomů a iontů, periodický zákon. Pojem ionizační energie a elektronová afinita.

Chemie vybraných nekovů

Vodík - výskyt, chemické a fyzikální vlastnosti, laboratorní příprava, průmyslová výroba, významné sloučeniny, využití.

Kyslík - výskyt v přírodě, fyzikální vlastnosti, chemické vlastnosti, laboratorní příprava, průmyslová výroba, významné sloučeniny.

Halogeny - výskyt v přírodě, fyzikální a chemické vlastnosti halogenů, příprava v laboratoři, průmyslová výroba, nejdůležitější sloučeniny.

Síra - výskyt, chemické a fyzikální vlastnosti, oxid siřičitý, oxid sírový, sulfan, kyselina sírová.

Dusík - výskyt v přírodě, chemické a fyzikální vlastnosti, laboratorní příprava, průmyslová výroba, významné sloučeniny

Fosfor - výskyt v přírodě, modifikace fosforu, chemické a fyzikální vlastnosti, průmyslová výroba fosforu, oxidy fosforu, kyselina fosforečná.

Uhlík - výskyt v přírodě, alotropické modifikace uhlíku, chemické a fyzikální vlastnosti, oxid uhelnatý, oxid uhličitý, využití uhlíku v praxi.

Chemie vybraných kovů

Chemie alkalických kovů. Chemie hliníku a železa. Chemie cínu a olova. Chemie mědi, stříbra a zlata.

Význam a základní principy organické chemie. Vazby v organických sloučeninách: iontová a kovalentní vazba, Lewisovy struktury, rezonanční struktury, pojem hybridizace.

Kyseliny a báze, polární a nepolární sloučeniny. Elektrofily a nukleofily, analogie s kyselinami a bazemi. Funkční skupiny jako centra reaktivity organických sloučenin.

Základní pojmy konformační analýzy, Newmanova projekce. Izomerie: empirické, molekulové a konstituční vzorce.

Chiralita obecně a chirální molekuly. Stereoizomerie, optická aktivita, stereocentrum. Absolutní konfigurace, R-S sekvenční pravidla, Fischerova projekce. Molekuly s více stereocentry: diastereomery, *meso* sloučeniny. Stereochemie v chemických reakcích.

Alkeny. Parametry π -vazby, stupeň nenasyčenosti, katalytická hydrogenace a relativní stabilita dvojných vazeb. Reakce alkenů: hydrogenace, elektrofilní adice, epoxidace peroxokyselinami, radikálové adice. Oxacyklopropany a jejich reakce. Elektrofilní substituce fenolů. Karboxylové kyseliny a jejich funkční deriváty. Adičně-eliminací mechanismus substituce na karboxylovém uhlíku. Alkanoyl (acyl) halogenidy a anhydridy, estery, amidy.

Struktura, fázový stav a základní vlastnosti polymerů. Zejména složení, velikost molekul, tvar molekul polymeru, organizovanost molekul, polymeru, vliv na vlastnosti, hlavní typy polymerů.

Základní mechanismy a výrobní postupy vzniku polymerů. Mechanismy polymerace: Radikálová, kationtová, aniontová, koordinační. Principy a příklady průmyslových syntéz – polymerace: bloková, suspenzní, emulzní, plynofázní, roztoková.

Základní polymery vznikající adiční polymerací: PE, PP, PS, PVC a základní polymery vznikající polykondenzací resp. Polyadící: Polyestery, polyamidy, epoxidové polymery, fenoplasty a aminoplasty, polyuretany

Fyzika plazmatu a povrchů

Krystalická a elektronová struktura povrchů pevných látek. Jejich principiální odlišnosti od analogických struktur v objemu. Ideální a reálný povrch. Získávání a udržování definovaných povrchů. Výstupní práce.

Vliv vysoké teploty na povrch. Termoemise elektronů. Termoemise iontů. Povrchová ionizace. Dopad elektromagnetického záření na povrch. Fotoelektronová emise. Základy fotoelektronových spektroskopíí.

Dopad elektronů na povrch. Sekundární elektron-elektronová emise. Elektronově indukovaná desorpce. Pružný odraz elektronů od neuspořádaných povrchů. Pružný odraz elektronů od uspořádaných povrchů a jejich difrakce.

Nepružná interakce elektronů s povrchem. Základy elektronových spektroskopíí. Veličiny povrchové analýzy.

Dopad těžkých částic na povrch. Iont-elektronová a iont-iontová sekundární emise. Základy iontové spektroskopie.

Vliv elektrického pole na povrch. Průnik pole do látky. Tunelová emise, ionizace polem, desorpce v elektrickém poli. Princip tunelového mikroskopu, elektronového a iontového projektoru.

Definice plazmatu, parametry plazmatu a jejich rozsah, typy plazmatu. Debyeovo stínění, plazmatická frekvence. Pružné a nepružné srážky. Elementární procesy – ionizace, rekombinace, reakce. Pohyblivost, vodivost plazmatu, (ambipolární) difúze. Přehled diagnostik a určených parametrů plazmatu, diagnostika sondová, vysokofrekvenční, optická a hmotnostní spektroskopie. Doutnavý výboj, dohasínající plazma, naprašování, magnetron.

Příprava a charakterizace nanomateriálů

Fyzikální a chemická příprava nanomateriálů

Fyzikálních metody přípravy nanomateriálů – top-down vs. bottom up procesy, napařování, plazmové depozice tenkých vrstev a nanočástic, plazmové modifikace a funkcionalizace povrchů, přehled litografických technik (EBL, UV-litografie, AFM litografie, koloidní a polymerní templatová nanolitografie).

Chemické metody přípravy nanomateriálů – příprava nanostruktur nulté dimenze (0D) – nanočástice, příprava jednodimenzionálních nanostruktur (1D) – nanodrátky, nanotrubičky, příprava dvoudimenzionálních nanostruktur (2D) – nanostrukturované povrchy,

Principy technik interkalace, chemické metody depozice nanočástic a chemické modifikace povrchů, hybridní organo-inorganické nanostruktury, dendrimerní nanokompozity a bionanotechnologie, přípravy nanočástic pomocí mikroorganismů.

Krystalochemické vlastnosti vrstevnatých silikátů, hydrotalcitů a dalších vrstevnatých struktur a jejich využití jako matrice pro funkční nanostruktury. Delaminace vrstevnatých struktur minerálů.

Interkalace, jako nástroj vytváření funkčních nanostruktur. Základy interkalační chemie. Interkalace vrstevnatých silikátů, hydrotalcitů, grafitu, sulfidů a dalších vrstevnatých struktur. Modifikace fyzikálních a chemických vlastností matrice i interkalantu. Využití interkalátů.

Povrchové modifikace struktur minerálů uktovením nanočástic kovů, oxidů a sulfidů. Význam a využití těchto typů nanokompozitů. Kvantové tečky.

Zeolity jako matrice pro funkční nanostruktury.

Základy fyziky a chemie polymerů (charakterizace a popis polymerních řetězců, mechanismy polymerace – polyadice, radikálová polymerace, ...). Metody přípravy polymerů a polymerních nanostruktur – sol-gel metody, plazmová polymerace, elektrostatické zvláknování, spin-coating a dip-coating.

Vodivé polymery a heterogenní struktury s vodivými polymery a jejich využití (solární články, senzory...).

Funkcionalizace polymerů – polymerní řetězce jako nosiče léčiv, plazmatické modifikace (biokompatibilita, smáčivost).

Polymerní nanovrstvy – ochranné povlaky (diamantu podobné vrstvy), funkční nanostruktury (vrstvy snižující tření, biokompatibilní materiály, superhydrofobní vrstvy...).

Nanokompozity s polymery: tenké vrstvy z metalorganických prekurzorů, kompozity polymer-kov a jejich využití.

Nanokompozity polymer-silikát, polymer-zeolit v souvislosti s jejich reologickými vlastnostmi.

Nanotextilie a jejich využití (filtry, nosiče léčiv, krycí materiály, ...).

Charakterizace materiálů a nanomateriálů

Struktura a vlastnosti pevných látek od makro k nanorozměrům, struktura látek a difrakce záření – symetrie struktur. Základní typy difrakčních experimentů a využití. Analýza difraktogramů v případě poručených krystalových struktur, textury, vnitřního plnutí a tenkých vrstev (Goebelovo zrcadlo).

Metody charakterizace materiálů a nanometriálů pomocí AFM, STM, SEM, TEM, SIMS, XPS, UV VIS a IR spektroskopii včetně příkladů použití.

Metody určení velikostí a tloušťek nanostrukturovaných materiálů (přímé a nepřímé), povrchové vlastnosti nanostrukturovaných materiálů (ablace materiálu, goniometrie, elektrokinetický potenciál, metody určení velikosti měrného povrchu a porozity materiálu).

Principy spektrofluorimetrie a dynamického laserového rozptylu, princip SPR efektu a možnosti využití k detekci.

Principy chromatografie (mobilní, stacionární fáze), rozdělení metody (plynová, kapalinová) a možnosti využití, Van Deemterova rovnice,

Bio-mikroelektromechanické systémy

BioMEMS a výrobní procesy BioMEMS – definice pojmů MEMS/BioMEMS, historie a využití MEMS/BioMEMS, materiály používané ve výrobních procesech MEMS a jejich vlastnosti (polymery, křemík, sklo, kovy a další.), výrobní procesy MEMS (fotolitografie, zpevňovací procesy, soft litografie, aditivní a subtraktivní procesy), lepení a spájení substrátů, vytváření propojovacích rozhraní MEMS/BioMEMS s okolím.

Senzory, biosenzory, mikrofluidní systémy – definice pojmů senzor/biosenzor/mikrosenzor/mikrofluidní systém, základní rozdělení senzorů, historie a klasifikace biosenzorů, klasifikace biorekogničních prvků, imobilizace biorekogničních prvků, definice pojmů mikrofluidní systém, Lab-on-a-chip (LOC) a Micro total analysis systems (μ TAS), jejich historie a využití v oblasti biologických a biomedicínských aplikacích.

Přiřazení předmětů k okruhům

Předmět SZZ - Fyzika a chemie nanomateriálů

Student dostane 1 otázku z následujících okruhů.

Okruhy

- A. Kvantová fyzika a chemie
 - a. KFY/P216 2012 Úvod do kvantové fyziky a spektroskopie
 - b. KFY/P228 2012 Základy kvant. chemie a spektra molekul

- B. Anorganická a organická a makromolekulární chemie
 - a. KCH/P301 2012 Organická chemie I
 - b. KCH/P207 2012 Anorganická chemie I
 - c. KCH/P402 2012 Makromolekulární chemie

- C. Fyzika plazmatu a povrchů
 - a. KFY/P230 2012 Fyzika povrchů
 - b. KFY/P750 2012 Fyzika plazmatu a plazmové technologie

Předmět SZZ - Příprava a charakterizace nanomateriálů

Student dostane 1 otázku z následujících okruhů.

Okruhy

- A. Fyzikální a chemická příprava nanomateriálů
 - c. KFY/P317 2012 Metody přípravy nanomateriálů
 - d. KFY/P319 2012 Polymerní nanomateriály
 - e. KFY/P424 2012 Nanomateriály na bázi přír. minerálů

- B. Charakterizace materiálů a nanomateriálů
 - a. KFY/P219 2012 Nanomateriály a jejich charakterizace
 - b. KFY/P217 2012 Struk. látek a dif. analýza v mater. výz
 - c. KTEV/2ELME 2012 Moderní elektroanalytické metody

- C. Bio-mikroelektromechanické systémy
 - a. KBI/P321 2012 Bio-mikroelektromechanické systémy

Na diplomu bude mít student 3 známky

1. Obhajoba diplomové práce

Předměty SZZ:

2. Fyzika a chemie nanomateriálů
3. Příprava a charakterizace nanomateriálů