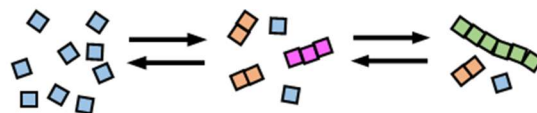


Modely růstu agregátů

Proces agregace, kdy se z monomerů stávají dimery, a pak delší a delší agregáty (viz **obr.**), se uplatní v mnoha různých oblastech. Roli monomeru může hrát například peptid β -amyloid, jehož agregáty tvoří amyloidní plak v mozku při Alzheimerově chorobě. Další typ monomerů jsou priony, jejichž agregace v mozku způsobuje nemoc šílených krav u dobytka či Creutzfeldovu-Jakobovu nemoc u lidí. Různé syntetické monomery se samy dokáží organizovat například do tzv. H- a J-agregátů, helikálních struktur, popřípadě jimi lze napodobovat chování přírodních prionů.

obr. ilustrace agregačního procesu



Agregační procesy lze modelovat pomocí rovnic chemické kinetiky, které musí mimo jiné zohlednit vznik nukleačních center, fragmentaci a existenci více agregačních drah.

Cílem tohoto projektu je prozkoumat existující poznatky o agregaci ve vědecké literatuře, zreprodukovat vybrané agregační modely na počítači a popsat možnosti jejich použití. Student se seznámí s tvorbou modelů chemické kinetiky a simulací agregačních procesů.

Práce bude zahrnovat studium vědecké literatury, analytické výpočty a počítačové simulace.

Vedoucí projektu: Václav Březina, Ph.D., *e-mail:* vaclav.brezina@matfyz.cuni.cz

Pracoviště: Katedra makromolekulární fyziky