

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI



pragolab

thermo
scientific

Authorized Distributor

MOLECULAR SPECTROSCOPY
NICOLET CZ
www.nicoletcz.cz

HPST



Agilent

Authorized
Distributor

Generálními sponzory Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci jsou firma ThermoFisher Scientific spolu s partnery Pragolab s.r.o. a Nicolet CZ s.r.o. a firma Agilent Technologies Inc. zastoupená autorizovaným distributorem HPST, s.r.o.

B U L L E T I N
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
JANA MARKA MARCI

186

únor 2020

<http://www.spektroskopie.cz>
e-mail sekretariátu: immss@spektroskopie.cz
telefonní číslo sekretariátu: 722 554 326

P.F. 2020

Redakční rada Bulletinu přeje všem členům Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci do nového roku hodně štěstí, zdraví a úspěchů v práci i v osobním životě. Předem děkujeme za Vaše příspěvky a upozornění na zajímavé akce u nás i v zahraničí.

107. schůze hlavního výboru Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci

Viktor Kanický

Schůze hlavního výboru se uskutečnila 29. listopadu 2019 v budově rektorátu Univerzity Pardubice na

náměstí Čs. legií. Zasedací místo pro jednání hlavního výboru a navazující soutěž mladých spektroskopiků zajistila docentka Anna Krejčová s profesorem Petrem Mikuláškem, vedoucím Ústavu chemického a environmentálního inženýrství fakulty chemicko-technologické, za což jim patří velký dík. Pardubice jsou ideálním místem pro setkávání lidí z celé republiky, neboť leží jen necelých 60 km od geografického středu našeho státu (obec Čihošt) a jsou dopravně velmi dobře obsluženy.

Hlavní výbor schválil jednomyslně výsledky hospodaření za období 1. 1. až 31. 10. 2019. Uplynulá tři čtvrtletí skončila s přebytkem. Stav za rok 2019 bude znám po uzavření poslední, listopadové akce Společnosti, kterou je Kurz AAS II a po zaplacení DPH. S největší pravděpodobností

bude výsledkem vyrovnaný rozpočet nebo mírný přebytek. Konečná čísla budou prezentována a projednána na červnové schůzi hlavního výboru.

Na schůzi byla podána také zpráva o průběhu odborných akcí. V roce 2019 Spektroskopická společnost JMM uspořádala nebo se podílela na organizaci pěti vědeckých a odborných setkání. Byly jimi: kurz Měření a interpretace vibračních spekter (dr. Člupek), 10. kurz ICP, seminář Radioanalytické metody (dr. Mizera), 20. Škola hmotnostní spektrometrie (doc. Nováková), 10. EMSLIBS (prof. Kaiser, prof. Kanický) a Kurz AAS II (dr. Sysalová). Vedle školy MS bylo největší akcí mezinárodní symposium 10. EMSLIBS (jubilejný Euro-Mediterranean Symposium on Laser Induced Breakdown Spectroscopy), organizované FSI VUT a CEITEC VUT ve spolupráci se SSJMM. Informace o průběhu těchto odborných setkání jsou průběžně zveřejňovány v Bulletinu. Účastníci všech odborných setkání byli velmi spokojeni a také hospodaření skončilo s finančním přebytkem. Pod záštitou SS JMM se uskutečnila také tradiční mezinárodní 34. Konference NMR ve Valticích.

Členové hlavního výboru informovali o stavu příprav odborných akcí v roce 2020, jimiž jsou kurz Měření a interpretace vibračních spekter, Kurz laserové ablaci, seminář skupiny instrumentální neutronové aktivační analýzy a 21. škola MS, kterou letos organizuje prof. Holčapek. V říjnu 2020 bude uspořádán Kurz rentgenfluorescenční analýzy, jak informoval doc. Černohorský. Pod záštitou Společnosti se uskuteční 35. Konference NMR ve Valticích.

Docent Ivan Novotný oznámil, že zpracovává digitalizované fotografie z historie Spektroskopické společnosti. Velké množství fotografií digitalizoval prof. Otruba; docent Novotný opatřuje fotografie popisem.

Po schůzi následovala Soutěž mladých spektroskopiků, organizovaná dr. Tomášem Matouškem. V kategorii diplomových prací (A) soutěžilo 11 studentů, v kategorii publikovaných prací (B) soutěžili 4 mladí spektroskopici. Zprávu o soutěži, výsledky a souhrny oceněných prací naleznete v závěru Bulletinu SS JMM.

Vzpomínka na Ing. Karla Ubika, CSc.

Dne 5. října 2019 ve věku 79 let zemřel Ing. Karel Ubik, CSc., významná osobnost české hmotnostní spektrometrie. Karel Ubik se narodil 22. srpna 1940 v Brně-Líšni, kde vyrůstal až do roku 1945. Rodina se pak několikrát stěhovala, nejprve do Přibyslavi, kde začal v roce 1946 chodit do školy, o čtyři roky později do Hlinska v Čechách, a v roce 1964 do Semtína u Pardubic. Po ukončení jedenáctileté střední školy byl přijat na VŠCHT v Pardubicích. Během studií se zapojil do vědecké práce školy jako asistent a později jako starší pomocná vědecká síla. V roce 1962 nastoupil vojenskou službu ve Výzkumném ústavu Ministerstva vnitra, kde po ukončení devítiměsíční vojenské služby ještě více než rok pracoval. Jeho vědecká kariéra je úzce spjata s Ústavem organické chemie a biochemie AV ČR (ÚOCHB AV ČR, dříve ÚOCHAB ČSAV) v Praze, kam nastoupil v roce 1965 na tříletý studijní pobyt a zůstal mu pak věrný plných 41 let. V ÚOCHB začínal v Ústřední analytické laboratoři, kde vyvíjel nové metody organické elementární analýzy. V roce 1970 obhájil kandidátskou disertační práci na téma Automatizace v organické elementární analýze. S hmotnostní spektrometrií začal v roce 1971, kdy přešel do laboratoře vedené doktorem Ladislavem Dolejšem. Laboratoř hmotové spektrometrie tehdy disponovala špičkovým hmotnostním spektrometrem MS902 (AEI). Karel se začal stále více zajímat o využití hmotnostní spektrometrie pro strukturní analýzu přírodních látek. Řada jeho prací z té doby je věnována identifikaci obranných látek a feromonů hmyzu, strukturní analýze těkavých látek, lipidům a kutikulárním voskům rostlin a hmyzu.

Vedoucím Laboratoře hmotové spektrometrie se stal v roce 1984 a jeho skupina se začala rychle rozvíjet. O tři roky později se hlavně jeho přičiněním podařilo zakoupit další skvělý přístroj, sektorový hmotnostní spektrometr ZAB-EQ (VG Analytical). S jeho pomocí studoval strukturu celé řady přírodních látek, steroidů, saponinů, fenolických látek, flavonoidů a alkaloidů. Značnou pozornost věnoval i strukturní analýze peptidů, zejména analogům inzulínu. Jeho laboratoř měla za úkol i rutinní servisní analýzy produktů organické syntézy a jeho rukama tak prošly stovky organických látek včetně těch s mimořádnými biologickými aktivitami, které později ÚOCHB proslavily. Karel Ubik byl velmi technicky nadaný a zejména jeho zásluhou se dařilo udržet spektrometr ZAB-EQ v provozu a v dobré kondici po mimořádně dlouho dobu - více než 22 let. V roce 2002 pořídil MALDI spektrometr Reflex IV (Bruker), což umožnilo rozvoj proteomické hmotnostní spektrometrie v ÚOCHB. Karel podporoval hmotnostní spektrometrii i v ostatních odděleních

Ústavu, pomáhal při výběru a provozu prvních stolních GC/MS a LC/MS přístrojů. Pro všechny byla mimořádným zážitkem již samotná návštěva jeho kanceláře v suterénní místnosti. Na stole, židlích, skříních, policích i okenním parapetu byly vysoké stohy různých papírů, dokumentů a časopisů, ve kterých se však bez problémů orientoval a vždy hned našel vše potřebné.



Foto © Karel Stránský (černobílá fotografie). Autor barevné fotografie je neznámý.

Karel Ubik absolvoval řadu zahraničních cest a několik stáží, během kterých spolupracoval s předními organickými chemiky včetně Prof. J. Meinwalda (Cornell University) a Prof. G. D. Prestwiche (University of Utah). Díky četným spolupracím v oblasti chemické ekologie navštívil kromě USA i řadu dalších států, namátkou

Bulharsko, Kubu nebo Mexiko. Publikoval více než 120 článků v odborných časopisech, nespočet konferenčních příspěvků a vytvořil několik patentů. Věnoval se i pedagogické činnosti, vydal skripta o hmotnostní spektrometrii, byl zván na přednášky na přední české univerzity i do zahraničí a pravidelně přednášel na Školách hmotnostní spektrometrie. Od roku 2006 si užíval zasloužený důchod ve svém domku ve Stehelčevsi na Kladensku, kde se věnoval svým koníčkům. Své bohaté zkušenosti však i nadále předával mladší generaci. Nelze opomenout jeho nadšení a pomoc při přípravě exponátů pro Muzeum hmotnostní spektrometrie v ústavu, v němž po většinu svého života úspěšně působil. Karel Ubik patřil mezi nestory české hmotnostní spektrometrie. Budeme na něj s úctou a vděčností vzpomínat.

Josef Cvačka

Kurz Atomové Absorpční Spektrometrie II

Jiřina Sysalová

Ve dnech 25. - 28. 11. 2019 se konal v konferenčním centru VŠCHT Praha (Praha 4 – Kunratice) kurz atomové absorpční spektrometrie s názvem **Kurz AAS II a příbuzné metody**, který byl určen všem, kteří již s AAS nějakou dobu pracují a chtějí si své vědomosti prověřit nebo rozšířit. Kurzu se zúčastnilo 29 zájemců, z toho 14 ze Slovenska. Všichni obdrželi nové učební texty, sestavené samotnými lektory kurzu, kteří také většinu kapitol na kurzu prezentovali. Redakce skript se ujal prof. Vítězslav Otruba, CSc. (MU Brno), věnoval se edičním a technickým pracím při vyhotovení skript, ve spolupráci s autory se podílel na případných odborných korekcích jednotlivých kapitol.

Kvalitní lektorský tým se skládal z předních našich specialistů v AAS, kteří mají letitou praxi v oboru, někteří učí na vysokých školách a všichni se věnují vědecké a odborné činnosti, takže pro ně nebyl problém odpovídat na různé dotazy účastníků, které se během přednášek nebo neformálně i během přestávek vyskytovaly.

Účastníci se mohli seznámit s výhodami moderní přístrojové techniky, presentovány byly i některé praktické aplikace, kde se AAS osvědčila a je stále úspěšně využívána. Nově byla na kurzu věnována pozornost atomové fluorescenční spektrometrii (AFS), která se v poslední době dostává stále více do popředí zájmu především z důvodu uplatnění ve speciační analýze. Samostatná přednáška byla věnována problematice stanovení rtuti a jejích forem,

včetně úpravy vzorků. Část přednášek byla věnována oblasti stopové a ultrastopové analýzy, především problémům s přípravou vzorků a způsobům jejich uchovávání, diskutovány byly požadavky na čisté laboratorní prostory, na používání vhodných pomůcek a vysoko čistých chemikálií, a výhody a nevýhody přímé analýzy pevných vzorků metodou AAS. Potřeby neustále snižovat meze stanovitelnosti ve stopové analýze vedou k vývoji různých úprav vzorků, jako jsou separační a prekoncentrační postupy, prováděné především v uzavřených systémech, kterým ve spojení s AAS a AFS byla věnována širší pozornost. Probrány byly i možnosti stanovení některých forem analytů, způsoby izolace analytu ze vzorku a využití různých tandemových technik v kombinaci s metodami AAS a AFS. Zařazeny byly i metody jednoduché extrakce a metody postupné chemické frakcionace prvků, jejich výhody a nedostatky při hodnocení uvolňování analytů z dané matrice. Praktické aplikace zahrnovaly využití AAS při analýze geologických materiálů, zemědělských produktů a potravin, prašných aerosolů a dalších materiálů, současně byly uvedeny i případné zdroje chyb při analýzách a způsoby jejich eliminace. Závěr kurzu patřil referenčním materiálům, jejich klasifikaci, významu a využívání v analytické praxi.

K pestrosti programu přispěly i přednášky 5 zástupců firem. Poděkování za podporu patří všem zúčastněným firmám, kterými byly: Amedis, s.r.o., Analytika, s.r.o., Anton Paar Czech Republic s.r.o., HPST, s.r.o., Chromspec, s.r.o., PE Systems, s.r.o., Pragolab, s.r.o., RMI, s.r.o. Účastníci měli možnost se zástupci firem konzultovat nabízené produkty a odnést si propagační materiály.

Poděkování patří i ochotnému a příjemnému personálu v KC VŠCHT Praha, který se o nás vzorně staral, někteří účastníci tak mohli využít ubytování v místě, v koleji Volha, byl zajištěn bezproblémový chod moderní promítací techniky, obstaráváno občerstvení dle našeho přání, takže kurz mohl probíhat v celkově příjemném a komorním prostředí. Účastníci kurzu kladně hodnotili fakt, že obdrželi učební texty již při registraci a na závěr osvědčení o absolvování kurzu.

Pro nás lektory a organizátory je zvláště potěšující, že ačkoli v posledních letech je na trhu řada konkurenčních přístrojových technik, metoda AAS je stále v laboratořích přítomna a má stále své příznivce i mezi mladými lidmi, jak ukázal tento kurz.

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie, ročník 2019

Tomáš Matoušek

Laskavostí Ústavu environmentálního a chemického inženýrství Fakulty chemicko-technologické Univerzity Pardubice se mohla stejně jako vloni uskutečnit Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie v historické budově Univerzity Pardubice. Prezentace prací proběhly pod dohledem vzácného hosta, čestného předsedy poroty **Doc. Václava Sychry**, v letech 1978 – 1989 místopředsedy Čs. spektroskopické společnosti a předsedy její atomové sekce.

Letos byla hojně obsazena zejména kategorie diplomových prací, kterých bylo prezentováno devět, v kategorii publikovaných prací pak čtyři soubory. Oproti předchozím ročníkům byly méně zastoupené tradičně silné obory jako vibrační spektroskopie či hmotnostní spektrometrie.

Kategorii diplomových prací zcela ovládli studenti Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy, vznikly tam všechny čtyři oceněné práce, tři na jejím Fyzikálním ústavu UK a jedna na Katedře nízkých teplot.

První cenu získal **Mgr. Jindřich Pipek** s prací o transportu náboje v polovodičových detektorech záření. Dvě druhé ceny patří **Mgr. Alžbetě Kuižové**, která rozvíjela Ramanovu spektroskopii z kapkově nanášených povlaků, a **Mgr. Ráchel Sgallové**, která zkoumala termodynamiku tvorby DNA vlásenek pomocí NMR. Třetí cenu získal **Mgr. Matyáš Zetek** za práci testující strukturní defekty v SiC detektorech záření pomocí spektroskopie foto-Hallova jevu. Rád bych ale vyzdvíhl i kvalitu ostatních soutěžících a jejich diplomových prací, byly též vynikající obsahem i prezentací.

V kategorii publikovaných prací a jejich souborů si první cenu odnesl **Ing. Michal Horák** ze Středočeského technologického institutu na Vysokém učení technickém v Brně, zabývající se elektronovou mikroskopíí a spektroskopíí plazmonických antén. Druhá cena byla udělena za práce v oboru anorganické stopové analýzy, **Ing. Antonínu Kaňovi, Ph.D.**. Na Ústavu analytické chemie Vysoké školy chemicko-technologické v Praze studoval omezení při stanovení nanočástic metodou single-particle ICP-MS. Konečně třetí cena jde opět na Fyzikální ústav UK Matematicko-fyzikální fakulty UK, pro **RNDr. Lukáše Berana**, za soubor prací věnovaných optické a magnetooptické

spektroskopii tenkých vrstev ferimagnetických granátů pro fotonické aplikace.

Zároveň bych rád poděkoval i autorům posudků soutěžních prací, které jsou důležitou součástí

soutěže, za ochotu najít si čas před koncem roku. Souhrny oceněných prací přinášíme dále. Pevně doufám, že se můžeme těšit na podobně skvělé práce mladých spektroskopiků i v příštích ročnících soutěže.

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie 2019

přehled oceněných prací

1. cena v kategorii diplomových prací

- **Mgr. Jindřich Pipek**, Fyzikální ústav UK, Matematicko - fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

název práce: **Transport náboje v polovodičových detektorech záření**

2. ceny v kategorii diplomových prací

- **Mgr. Alžbeta Kuižová**, Fyzikální ústav UK, Matematicko- fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

název práce: **Ramanova spektroskopie kapkově nanášených povlaků biologicky významných molekul**

- **Mgr. Ráčel Sgallová**, Katedra fyziky nízkých teplot, Matematicko- fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

název práce: **Termodynamika tvorby DNA vlásenek**

3. cena v kategorii diplomových prací

- **Mgr. Matyáš Zetek**, Fyzikální ústav UK, Matematicko- fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

název práce: **Structure defects in SiC radiation detectors**

1. cena v kategorii publikovaných prací

- **Ing. Michal Horák**, Středoevropský technologický institut, Vysoké učení technické v Brně

název souboru prací: **Elektronová mikroskopie a spektroskopie plazmonických antén**

2. cena v kategorii publikovaných prací

- **Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.**, Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

název souboru prací: **Omezení stanovení nanočástic metodou single-particle ICP-MS**

3. cena v kategorii publikovaných prací

- **RNDr. Lukáš Beran**, Fyzikální ústav UK, Matematicko- fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

název souboru prací: **Optická a magnetooptická spektroskopie tenkých vrstev ferimagnetických granátů pro fotonické aplikace**

Transport náboje v polovodičových detektorech záření

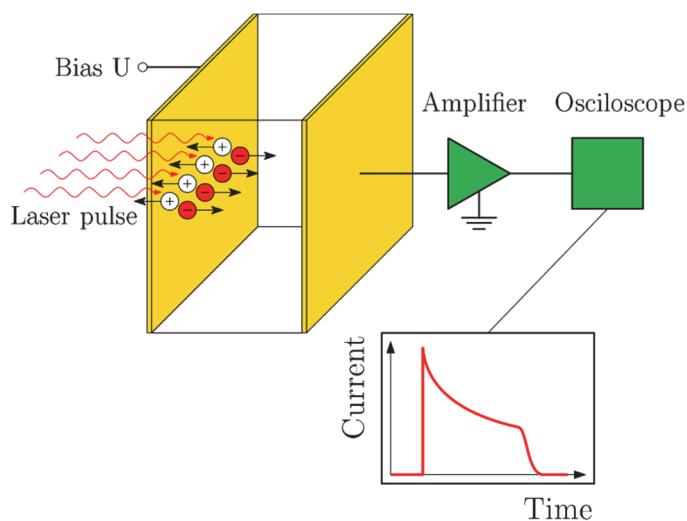
Mgr. Jindřich Pipek

Univerzita Karlova, Matematicko-fyzikální fakulta

Fyzikální ústav UK

E-mail: pipek@karlov.mff.cuni.cz

Předkládaná diplomová práce vznikla v oddělení Optoelektroniky a magnetooptiky Fyzikálního ústavu MFF UK v rámci dlouhodobého výzkumu polovodičových detektorů záření. Jejím cílem bylo nalezení metodiky charakterizace transportu náboje v polovodičových detektorech pomocí měření transientních proudů generovaných laserovými pulsy (Laser-induced Transient current technique). Schéma měřící aparatury je na obrázku 1, kde zleva dopadající laserový puls, generuje v detektoru elektron-děrové páry. Pokud se použije světlo s energií fotonu větší než je šířka zakázaného pásu energií v polovodičovém materiálu detektoru, jsou elektron-děrové páry generovány pouze těsně pod ozářeným elektrickým kontaktem. Elektron-děrové páry jsou roztrženy v přiloženém elektrickém poli, díry jsou ihned sebrány na katodě a pouze elektrony driftují detektorem k anodě. Pohyb elektronů způsobuje elektrický proud, který je zesílen pomocí zesilovače a zobrazen na osciloskopu. Z délky a tvaru proudové odezvy lze stanovit transportní parametry detektoru. Tato metoda již byla využívána v minulosti, ale poslední dobou se opět dostává do popředí a zájmu světových laboratoří a firem vyrábějících polovodičové radiační detektory.



Obrázek 1 Schéma aparatury pro měření transientních proudů

V rámci diplomové práce byla vyvinuta metodika měření transientních proudů využívající pulsního přiloženého napětí na detektorech, která umožňuje detailní výzkum dynamiky tvorby prostorového náboje v radiačních detektorech. Při řešení diplomové práce se ukázalo, že dosud používané teoretické modely dosud všechny nepopisovaly experimentální výsledky získané pomocí metody měření transientních proudů, proto bylo nutné rozšířit stávající modely a ověřit jejich platnost pomocí Monte Carlo simulací. Byl vytvořen nový model zahrnující prostorový náboj vytvořený záhytem nosičů náboje na mělkých i hlubokých pastech, které významným způsobem ovlivňují kvalitu detektorů.

Hlavním přínosem práce je nalezení metodiky charakterizace kvality radiačních detektorů záření pomocí měření transientních proudů a použití Monte Carlo simulací tvaru měřených proudových pulsů pro získání široké škály transportních parametrů detektorů, které

charakterizují jejich kvalitu. Bylo zjištěno, že tato metodika může plně nahradit standardní spektroskopické metodiky využívající alfa částic a gama záření k charakterizaci kvality detektorů. Práce je významná především svým komplexním přístupem k určení fyzikálních faktorů ovlivňujících výsledné vlastnosti vyrobených detektorů. Výsledky práce Mgr. Jindřich Pipek prezentoval na mezinárodní konferenci 19th International Workshop on Radiation Imaging Detectors 2017 v Krakově a byly z části publikovány v časopise Applied Physics Letters 11, (2017) 82103. Výsledky týkající se charakterizace elektrických kontaktů Mgr. Jindřich Pipek prezentoval na konferenci 25th International Symposium on Room-Temperature Semiconductor X-Ray & Gamma-Ray Detectors 2018 v Sydney.

Ramanova spektroskopie kapkově nanášených povlaků biologicky významných molekul

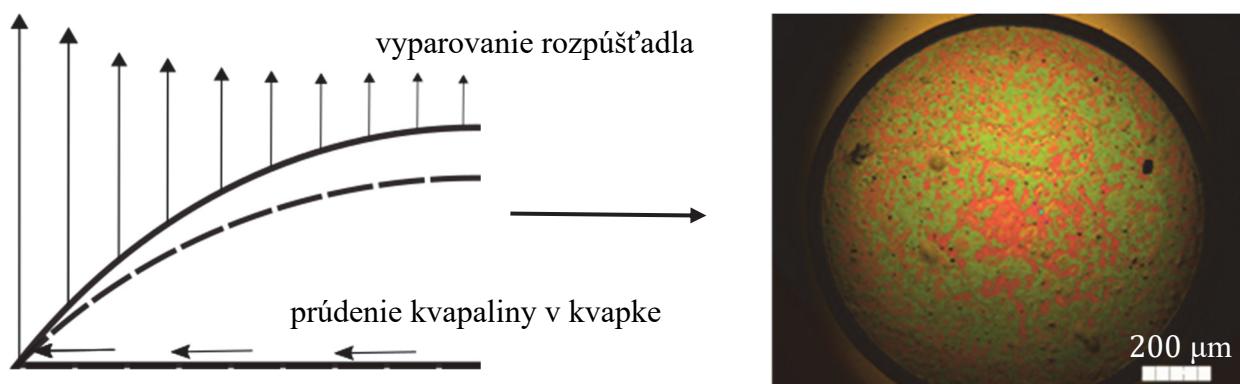
Mgr. Alžbeta Kuižová

Fyzikální ústav UK,
Oddelení fyziky biomolekul,
E-mail: betka.kuizova@gmail.com

Ramanova spektroskopia ako metóda optickej vibračnej spektroskopie nachádza svoje uplatnenie v širokej škále odvetví, napríklad pri štúdiu štruktúry či funkcie rôznych biologicky významných molekúl. Metóda je ale obmedzená všeobecne malou intenzitou meraného signálu a v biochemických vedách naráža na problém nízkej koncentrácie a malého objemu meraných vzoriek. V našej práci sme sa zaoberali špeciálou technikou Ramanovej spektroskopie, Ramanovou spektroskopiou kvapkovo nanášaných povlakov DCDR (z angl. Drop Coating Deposition Raman), ktorá spomínané nevýhody dobre eliminuje a je vhodná práve v prípade vzoriek s nízkou koncentráciou ($< 1\mu\text{M}$) a s malým objemom ($\sim\mu\text{l}$).

Princíp metódy DCDR spočíva v zasychaní kvapky pôvodného roztoku či suspenzie na substráte, s ktorým kvapka zviera nenulový kontaktný uhol. Počas schnutia kvapky na podložke dochádza k toku kvapaliny spolu s materiálom (skúmané molekuly, látky) k okraju kvapky, čo často vedie k tvorbe „kávového krúžku“. Týmto procesom dochádza k významnému zakoncentrovaniu skúmanej vzorky z pôvodného roztoku či suspenzie do obvodu vzniknutého prstence (obr. č. 1).

Metóda DCDR sa začala rozvíjať až začiatkom 21. storočia a medzi prvé vzorky patrili roztoky proteínov (Zhang, 2003). Citlivosť metódy sa potvrdila pri detekcii spektrálnych zmien indukovaných fosforyláciou peptidu (Xie, 2004) či pri určení množstva naviazaného ligandu (Xie, 2008). Z medicinskeho hľadiska sa metóda osvedčila pri sledovaní glykemickej histórie u pacientov s ochorením diabetes, kde bola vypracovaná štúdia detekcie glykovaného albumínu (Dingari, 2012). Metóda ďalej smeruje k analýze telových tekutín, ako sú slzy, moč, mozgomiechový mok, atď., kde je koncentrácia biomolekúl na úrovni fyziologických podmienok, a teda veľmi nízka pre klasickú Ramanovu spektroskopiu.



Obr. č. 1 Vysychanie kvapky spojené s priúdením rozpúšťadla smerom k jej okraju, kedy zároveň dochádza aj k prenosu materiálu (vľavo), čo vedie k vzniku zakoncentrovaného prstence v tvare „kávového krúžku“ (vpravo – príklad prstence po uschnutí kvapky suspenzie lipozómov DPPC s koncentráciou 1,36 mM).

Na samotné zasychanie nanesenej kvapky má veľký vplyv použitý substrát, preto sme sa v rámci metódy DCDR zaoberali účinnosťou zakoncentrovania suspenzie lipozómov na substrátoch s rôznou hydrofobicitou a pri rozdielnej teplote zasychania. Skúmali sme hladký substrát s fluorokarbónovým filmom tvorený nadepovaným polytetrafluoretylénom s dobrými hydrofóbnymi vlastnosťami a originálne nanodrsné substráty, ktorých hydrofobicita bola dosiahnutá nadepovanými medenými a striebornými nanočasticami. Nanodrsné substráty boli v rámci metódy DCDR použité po prvýkrát. Všetky nami použité a skúmané substráty boli vyrobené na Katedre makromolekulárnej fyziky MFF UK.

Účinnosť zakoncentrovania použitej suspenzie lipozómov z lipidu DPPC pre štyri rôzne koncentrácie a rovnaký objem nanesenej kvapky pre skúmané substráty sme porovnávali pomocou Ramanových spektier zozbieraných z obvodu vyschnutých prstencov, pričom sme sa zamerali na spektrálnu oblasť C – H valenčných vibračných módov ($2800 - 3100 \text{ cm}^{-1}$).

Na základe nameranej intenzity signálu sme ukázali, že zvyšovanie nanodrsnosti substrátu pomocou nadepovaných nanočastic, a teda zvyšovanie hydrofobicity substrátu, vedie k vyššiemu nameranému signálu. S rastom hydrofobicity tak dochádza k lepšiemu zakoncentrovaniu pôvodnej suspenzie a k vyššej nameranej intenzite. K výraznému rozdielu nameraných intenzít dochádzalo pri prechode z hladkého povrchu na nanodrsný a ďalšie zvyšovanie nanodrsnosti pomocou vyššej koncentrácie nadepovaných nanočastic už k výraznému zlepšeniu signálu neviedlo. Zároveň sme pre nanodrsné substráty pozorovali veľký rozptyl nameranej intenzity spektrálnych pásov z rôznych miest z obvodu vzniknutého prstenca, čo je dôsledkom nehomogenného zakoncentrovania pôvodnej suspenzie. Takéto nehomogénne zakoncentrovanie pripisujeme práve prítomným nadepovaným nanočasticiam. Kvapky suspenzie lipozómov sme pre hladký substrát a substrát s nadepovanými striebornými nanočasticami následne nechali zasychať pri rôznych teplotách (v rozsahu od 15 do 60 °C). V nameraných spektrách pre rôzne teploty zasychania sme nepozorovali spektrálne zmeny súvisiace s fázovým prechodom použitého lipidu, no pre teploty zasychania nad teplotou fázového prechodu použitého lipidu sme na výsledných prstencoch pozorovali vznik nehomogenít, ktoré viedli k vyššiemu Ramanovmu signálu, čo je dôsledkom toho, že išlo o miesta s vyšším zakoncentrovaním.

V práci sme skúmali originálne hydrofóbne substráty, ktorých vyššia hydrofobicita bola docielená nadepovanými nanočasticami, nanodrsné substráty boli pre metódu DCDR použité po prvýkrát. Na základe našich meraní sme ukázali, že na nanodrsných povrchoch v porovnaní s hladkým hydrofóbnym substrátom dochádza k lepšiemu zakoncentrovaniu suspenzie, čoho dôsledkom je vyšší Ramanov signál. Zároveň sme ukázali, že k lepšiemu zakoncentrovaniu dochádza aj pri zasychaní suspenzie nad teplotou fázového prechodu nami použitého lipidu v podobe vzniknutých nehomogenít na prstenci, ktoré vedú k vyššiemu Ramanovmu signálu.

Literatúra

- Dingari N. Ch., Horowitz G. L., Kang J. W., Dasari R. R., Barman I.: PloS ONE. 7, 1 (2012)
Xie Y., Zhang D., Jarori G. K., Davisson V. J., Ben-Amotz D.: Anal. Biochem. 322, 116 (2004)
Xie Y., Zhang D., Ben-Amotz D.: Anal. Biochem. 373, 154 (2008)
Zhang D., Xie Y., Mrozek M. F., Ortiz C., Davisson V. J., Ben-Amotz D.: Anal. Chem. 75, 5703 (2003)

Termodynamika tvorby DNA vlásenek

Mgr. Ráchel Sgallová

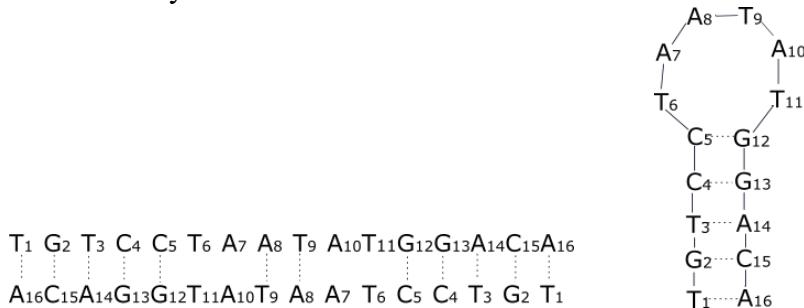
Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova

Katedra fyziky nízkých teplot

E-mail: rachel.sgallova@centrum.cz

Deoxyribonukleová kyselina (DNA) je chemická sloučenina naprosto nezbytná pro život. I přesto, že její struktura je známá déle než půl století, zůstává stále mnoho otázek o fungování DNA v buňkách nezodpovězeno. Jednou z nich je otázka mechanismu rozeznávání specifických sekvencí DNA transkripčními faktory.

Transkripční faktory (TF) jsou proteiny, které se specificky váží k určitým sekvencím DNA a hrají klíčovou roli při iniciaci transkripce. Jako nejjednodušší mechanismus vazby TF k DNA se nabízí vázání TF k náhodným sekvencím DNA a následná disociace, dokud nedojde k vazbě ke správné sekvenci DNA. Vzhledem k délce DNA by takovýto proces trval velmi dlouho a byl by proto značně neefektivní [1]. Je proto pravděpodobné, že při vazbě TF k DNA hrají roli komplikovanější mechanismy.



Obr. 1: Možné sekundární struktury sekvence DNA promotoru lidského genu *c-fos*, vlevo je částečně selfkomplementární duplex, vpravo je vlásenka, čárkovány jsou vyznačeny Watsonovy-Crickovy páry bází očekávatelné v dané struktuře.

Serum Response Factor (SRF) je TF, který se váže k sekvenci DNA nazývané CArG box nacházející se například v promotoru lidského genu *c-fos*. Při vazbě nejspíše hraje významnou roli strukturní flexibilita CArG boxu [2]. Sekvence CArG boxu je částečně selfkomplementární, což teoreticky umožňuje tvorbu dvou typů sekundárních struktur (viz obr. 1). Tvorba vlásenky by znamenala výrazné odchýlení od dvoušroubovicové struktury, což by mohlo značně urychlovat rozpoznávání CArG boxu a vysvetlovat vysokou afinitu SRF k CArG boxu.

Jednou ze spektroskopických metod vhodných ke studiu DNA je jaderná magnetická rezonance (NMR). Při NMR dochází k interakci radiofrekvenčního pole s jadernými momenty vzorku ve statickém magnetickém poli, přičemž rezonanční frekvence jádra závisí na jeho chemickém okolí, tato metoda proto může poskytnout cenné informace o struktuře DNA.

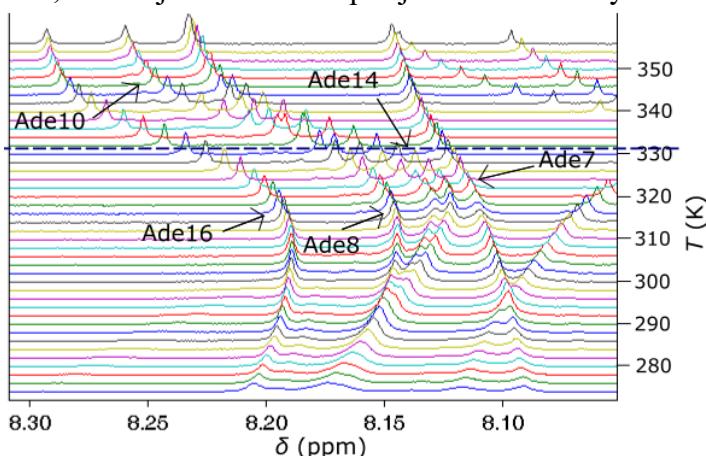
Cílem této práce bylo studovat krátké sekvence DNA se sekvencí odpovídající CArG boxu v promotoru lidského genu *c-fos* pomocí NMR a rozhodnout, zda lze prokázat tvorbu vlásenek. Studovány byly sekvence DNA o délce 12, 14 a 16 nukleotidů, přičemž nejdelší sekvence byla zkoumána ve dvou různých koncentracích.

Z obr. 1 je vidět, že jedním z hlavních rozdílů mezi možnými sekundárními strukturami studovaných vzorků je počet molekul. Vlásenka je jednomolekulární struktura, její teplota tání proto nezávisí na koncentraci, oproti tomu teplota tání duplexu na koncentraci musí záviset,

protože se jedná o dvoumolekulární strukturu. Studium stejné sekvence v různých koncentracích může proto pomoci v rozlišení mezi možnými sekundárními strukturami.

Pro všechny studované sekvence jsem změřila jednorozměrná ^1H spektra v teplotním rozsahu 274 až 356 K a dvourozměrná spektra ^1H - ^1H NOESY a ^1H - ^{13}C HMBC. Spektra NOESY zviditelnějí dvojice jader, mezi kterými dochází k jadernému Overhauserovu jevu. Tento jev je důsledkem přímé interakce magnetických dipólů přes prostor, dochází k němu proto pouze mezi jádry, která jsou blízko sebe. Spektra HMBC využívají interakce magnetických dipólů přes chemické vazby, lze pomocí nich určit, které signály adeninových vodíků H8 a H2 patří vodíkům ze stejného nukleotidu. Díky tomu jsem přiřadila jednotlivé signály konkrétním atomům vodíku ve zkoumané molekule.

Z naměřených teplotních závislostí ^1H spekter jsem určila termodynamické parametry tvorby sekundárních struktur ve zkoumaných vzorcích. Jedním z těchto parametrů je i teplota tání, kterou je možné určit pro jednotlivé vodíky v dané molekule (viz obr. 2).



Obr. 2: Část teplotní závislosti ^1H spekter nejdelšího zkoumaného vzorku obsahující chemické posuvy adeninových vodíků H8, chemické posuvy jednotlivých vodíků se s teplotou mění díky rychlé chemické výměně. Modře je vyznačena průměrná teplota tání těchto vodíků.

Na základě provedených experimentů jsem zjistila, že tvorbě vlásenek ve studovaných vzorcích nasvědčuje řada argumentů:

- Teplota tání nejdelší sekvence nezávisí na koncentraci.
- Chemické posuvy některých vodíků v neselfkomplementární části řetězce se značně odlišují od predikcí pro duplex.
- Spektra NOESY obsahují řadu signálů očekávaných pro vlásenku a neočekávaných pro duplex, a naopak v nich chybí či je méně intenzivní řada signálů typických pro duplex.

Lze tedy pokládat za prokázané, že ve studovaných vzorcích dochází k tvorbě vlásenek. Tato odlišnost sekundární struktury od B-DNA by mohla být vysvětlením vysoké afinity SRF k CArG boxu.

Literatura:

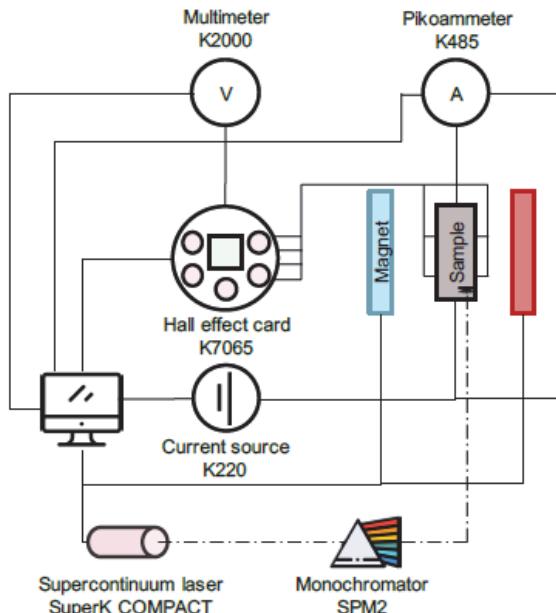
- [1] FRIEDMAN, Larry J.; MUMM, Jeffrey P.; GELLES, Jeff. RNA polymerase approaches its promoter without long-range sliding along DNA. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2013, 110.24: 9740-9745.
- [2] HUET, Alexis, et al. Mechanism of binding of serum response factor to serum response element. *The FEBS journal*, 2005, 272.12: 3105-3119.

Structure defects in SiC radiation detectors

Mgr. Matyáš Zetek

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy, Fyzikální ústav
Oddělení optoelektroniky a magnetooptiky
E-mail: zetek001@gmail.com

Na Fyzikálním ústavu MFF UK v oddělení optoelektroniky a magnetooptiky jsem se zabýval zkoumáním hlubokých hladin v semi-izolačním SiC pomocí optických měření. Znalost hlubokých hladin je absolutně nezbytná pro studium detektorů a detektorových materiálů, protože hluboké hladiny silně ovlivňují detekční schopnosti materiálu. Pro detekci hlubokých hladin jsem využil poměrně málo používané metody Photo-Hall Effect Spectroscopy (PHES). Tato metoda je založena na měření klasického Hallova jevu s přídavným kontinuálním osvitem vzorku, viz schéma na obrázku 1.



Obrázek 1: Schéma zapojení použité pro měření PHES

Principem této metody je, že s použitím monochromátoru se osvěcuje vzorek definovanou vlnovou délkou v širokém intervalu vlnových délek, kdy dochází k zviditelní hladiny uvnitř zakázaného pásu, viz schéma na obrázku 2. Zviditelnění hladiny může nastat dvěma způsoby:

- Dojde k excitaci elektronu z valenčního pásu na hladinu
- Dojde k excitaci elektronu z hladiny do pásu vodivostního

Oba tyto projevy zanechají specifickou stopu ve spektrální závislosti elektrické vodivosti a Hallovu pohyblivost. Vyjděme ze vzorečků pro směsnou vodivost:

$$\sigma = e[\mu_h p + \mu_e n]$$

a směsnou Hallovu pohyblivost:

$$\mu_H = \frac{|p\mu_h^2 - n\mu_e^2|}{p\mu_h - n\mu_e}$$

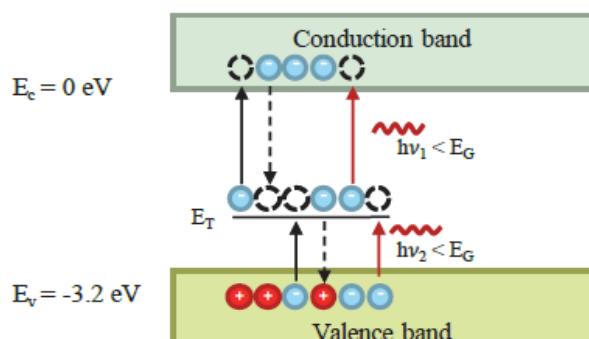
kde σ je vodivost, p je koncentrace dér, n je koncentrace elektronů, μ_H je Hallova pohyblivost, μ_h je pohyblivost dér a μ_e je pohyblivost elektronů. Jestliže uvažujeme n-typový polovodič, pro jednotlivé případy a) a b) dochází:

- a) K zvýšení elektrické vodivosti a zároveň ke snížení Hallovy pohyblivosti
- b) K zvýšení elektrické vodivosti a zároveň ke zvýšení Hallovy pohyblivosti

Jedná se tedy o velice zajímavou metodu zjišťování hlubokých hladin v širokopásových polovodičích, která má oproti běžně používaným metodám několik výhod:

1. Umožňuje rozlišit příspěvek elektronů a dér
2. Dovoluje detektovat hladiny poblíž středu zakázaného pásu

Tato metoda najde své uplatnění především při charakterizaci silně kompenzovaných a intrinsických polovodičů s vysokým odporem.

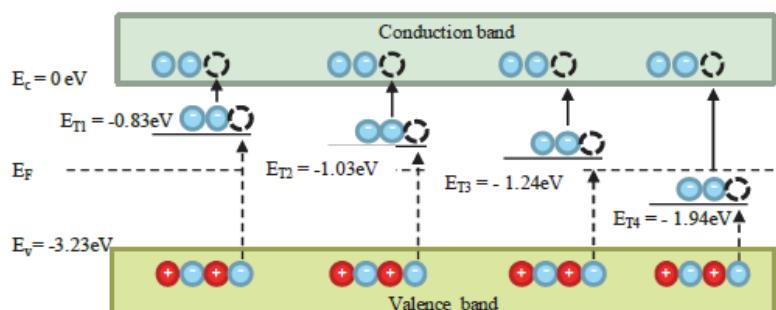


Obrázek 2: Schématické zobrazení zviditelnění hladiny přídavným osvitem světlem a vyobrazení dvou případů elektronových přechodů a) a b)

V druhé části práce jsem se zabýval žíháním vzorků v rozličných žihacích podmínkách, kdy dochází k ovlivnění defektní struktury. Výsledky žíhání jsem využil jako analytický nástroj pro zjištění podstaty hlubokých hladin v materiálu.

Pomocí těchto dvou hlavních metod a spolu s měřením fotoluminiscence a teplotně závislého Hallova jevu jsem byl schopen určit 4 hluboké hladiny v našem materiálu SiC. Rozložení těchto hladin v zakázaném pásu je na obrázku 3.

Znalost takto detailního rozložení hlubokých hladin a způsobu jejich ovlivnění nám do budoucna umožnuje přizpůsobit podmínky růstu SiC monokrystalů pro získání dokonalejších detektorů záření.



Obrázek 3: Rozložení hlubokých hladin v semi-izolačním SiC

Elektronová mikroskopie a spektroskopie plazmonických antén

Ing. Michal Horák

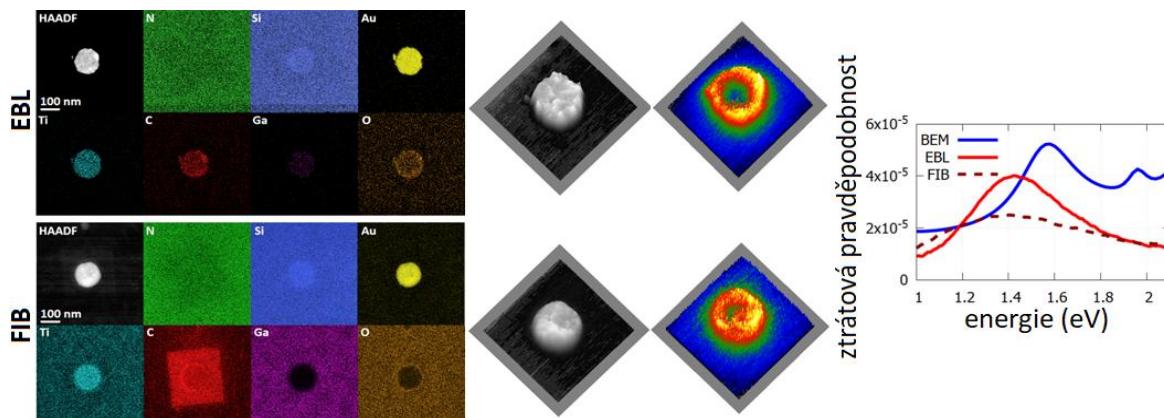
Vysoké učení technické v Brně,
Středoevropský technologický institut,
E-mail: michal.horak2@ceitec.vutbr.cz

Seznam soutěžních prací:

1. Horák, M.; Bukvišová, K.; Švarc, V.; Jaskowiec, J.; Křápek, V.; Šikola, T.
Comparative study of plasmonic antennas fabricated by electron beam and focused ion beam lithography.
Sci. Rep. **2018**, 8, 9640.
2. Horák, M.; Křápek, V.; Hrtoň, M.; Konečná, A.; Ligmajer, F.; Stöger-Pollach, M.; Šamořil, T.; Paták, A.; Édes, Z.; Metelka, O.; Babocký, J.; Šikola, T.
Limits of Babinet's principle for solid and hollow plasmonic antennas.
Sci. Rep. **2019**, 9, 4004.
3. Ligmajer, F.; Horák, M.; Šikola, T.; Fojta, M.; Daňhel A.
Silver Amalgam Nanoparticles and Microparticles: A Novel Plasmonic Platform for Spectroelectrochemistry.
J. Phys. Chem. C **2019**, 123, 16957–16964.
4. Horák, M.; Křápek, V.; Šikola, T.
Plazmonové rezonance ve zlatých nanočásticích zkoumané s využitím elektronové mikroskopie.
Jemná mechanika a optika **2017**, 62, 303–305.

Soutěžní práce se zabývají charakterizací plazmonických nanostruktur s využitím elektronové mikroskopie a spektroskopie. Plazmonika studuje povrchové plazmonové polarity, což jsou kolektivní oscilace plazmatu volných elektronů na rozhraních kovu a dielektrika. Na površích malých kovových struktur (plazmonických antén) vytvářejí stojaté vlny – lokalizované plazmonické rezonance (LPR). Plazmonické antény nacházejí uplatnění v širokém okruhu aplikací – např. v komunikačních technologiích, senzorice, medicíně či energetice. Využívá se přitom jejich schopnosti lokálně soustředit elektromagnetické pole a současně je silně zesílit, což vede k vyšší intenzitě optických procesů, vyšší citlivosti spektroskopických metod a umožnuje jejich lepší prostorové rozlišení. Pomocí velikosti, tvaru a dielektrických vlastností plazmonických antén, potažmo substrátů, lze snadno vyladit velké množství optických vlastností pro dané aplikace.

Mapování LPR s vysokým prostorovým a spektrálním rozlišením v plazmonických anténách je zásadní pro porozumění jejich vzniku a pochopení jejich vlastností. Tohoto docílíme využitím rastrovací transmisní elektronové mikroskopie (STEM – Scanning Transmission Electron Microscopy) v kombinaci se spektroskopii energiových ztrát elektronů (EELS – Electron Energy Loss Spectroscopy) a katodoluminiscencí. Tyto spektroskopické techniky detekují LPR s nanometrovým prostorovým rozlišením a energiovým rozlišením 0.1 eV v případě EELS a energiovým rozlišením v řádu desítek milielektronvoltů v případě katodoluminiscence. Kombinace STEM a energiové spektroskopie rentgenového záření (EDS – Energy Dispersive X-ray Spectroscopy) umožňuje chemickou analýzu vzorku s atomárním rozlišením.



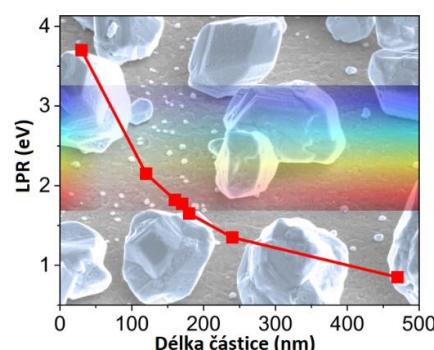
Obr. 1. Vlevo: Chemické složení zlaté plazmonické antény (disku o průměru 140 nm) vyrobené elektronovou (EBL) a iontovou (FIB) litografií měřené EDS. Uprostřed: 3D rekonstrukce antény a mapa základního módu LPR změřená EELS. Vpravo: Srovnání ztrátové pravděpodobnosti naměřené EELS na obou anténách s teoretickým modelem ideální zlaté diskové antény spočítaným metodou konečných prvků (BEM).

První článek se zabývá výrobou plazmonických antén. Srovnává plazmonické antény vyrobené elektronovou (EBL – Electron Beam Lithography) a iontovou (FIB – Focused Ion Beam) litografií. Chemická analýza je provedena metodou EDS a detekuje složení membrány z nitridu křemíku, titanové adhezní vrstvy, zlata a kontaminantů – uhlíku, kyslíku a v případě iontové litografie i galia. Mapování LPR a tloušťkového profilu antén je změřeno pomocí EELS. Zjistili jsme, že přestože obě techniky výroby jsou vhodné pro výrobu plazmonických antén, EBL by měla být upřednostňována před iontovou litografií díky lepší kvalitě výsledných antén, jejich menší kontaminaci a jejich silnější plazmonické odezvě (Obr. 1). Antény vyrobené iontovou litografií mají neostré okraje, vykazují výrazné kolísání tloušťky a jsou také silně kontaminovány nejen organickými kontaminanty, ale také rezidui po iontové litografii včetně implantovaných iontů z iontového svazku a atomů titanové adhezivní vrstvy.

Druhý článek zkoumá experimentálně a teoreticky Babinetův princip komplementarity v plazmonice. Použili jsme EELS a katodoluminiscenci pro zkoumání elektromagnetické odezvy elementární plazmonické antény: zlatého disku a komplementární apertury ve zlaté vrstvě. Potvrdili jsme kvalitativní platnost Babinetova principu (částice a apertury mají podobnou energii LPR a prostorové rozložení blízkého elektrického pole apertury přibližně odpovídá rozložení blízkého magnetického pole apertury), avšak zjistili jsme kvantitativní rozdíly související s energetickým a kvalitativním faktorem LPR a amplitudou blízkých polí. Tato zjištění otevírají možnost volby mezi oběma typy plazmonických antén v závislosti na požadovaných výrobních omezeních a provozních podmínkách v širokém spektru aplikací včetně návrhu metamateriálů.

Třetí článek je zaměřen na stříbrný amalgám, nový a velmi perspektivní plazmonický materiál. Změnou velikosti stříbrných amalgámových nanostruktur může být jejich plazmonová rezonance laděna od oblasti ultrafialového záření přes celou viditelnou až po infračervenou oblast (Obr. 2). Jelikož stříbrný amalgám je dobře prozkoumán v oblasti elektrochemie, stříbrné amalgámové nanočástice otevírají možnost kombinovat plazmoniku a elektrochemii dohromady.

Čtvrtý článek populární cestou představuje problematiku plazmonických antén a mapování jejich LPR pomocí elektronové mikroskopie a spektroskopie (EELS a katodoluminiscence).



Obr. 2. Závislost energie LPR na délce nanočástice (červeně). Na pozadí je mikrogram mikro- a nanočástic stříbrného amalgamu z rastrovacího elektronového mikroskopu.

Omezení stanovení nanočástic metodou single-particle ICP-MS

Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

Ústav analytické chemie VŠCHT Praha

E-mail: kanaa@vscht.cz

Seznam soutěžních prací:

1. Kaňa, A.; Loula, M.; Koplík, R.; Vosmanská, M.; Mestek, O.

Peak bordering for ultrafast single particle analysis using ICP-MS.

Talanta **2019**, 197, 189-198.

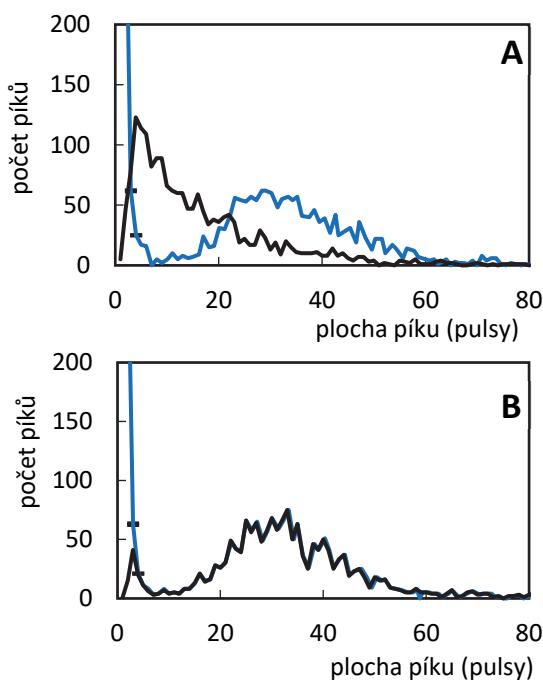
2. Loula, M.; Kaňa, A.; Mestek, O.

Non-spectral interferences in single-particle ICP-MS analysis: An underestimated phenomenon.

Talanta **2019**, 202, 565-571.

Hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem (ICP-MS) je v dnešní době kromě klasické prvkové analýzy inovativně využívána také pro stanovení číselné koncentrace a velikosti nanočástic ve zředěných suspenzích. Stanovení nanočástic metodou ICP-MS (single-particle ICP-MS) je založeno na rychlém záznamu časově rozlišeného signálu. Nanočástice, která je přivedena do plazmatu, je atomizována, utvoří obláček iontů, který se na časově rozlišeném záznamu objeví jako přechodový signál (pík) o šířce řádově stovek μ s. Plocha píku je pak úměrná velikosti nanočástice, počet píků pak číselné koncentraci nanočástic. Instrumentace pro sp-ICP-MS analýzy se rychle vyvíjí, což s sebou kromě výhod přináší také nečekaná omezení.

První publikace je zaměřena na studium metody sp-ICP-MS z hlediska ultrarychlého snímání signálu. Vysoká frekvence snímání signálu, která může být u současných přístrojů až 100 000 Hz, umožnuje detailně proměřit profil každého píku odpovídajícího nanočástici, což přináší možnost lépe analyzovat menší nanočástice, či provést dekonvoluci dvou částečně překrývajících se píků. V praxi se však ukazuje, že využití ultrarychlého snímání signálu, zvláště v kombinaci s analýzou malých nanočástic (např. 40 nm Ag nanočástice), vede k selhání výpočetních algoritmů komerčního software Syngistix, který je určený pro využití tohoto typu analýz. Vlivem měření velmi malých intenzit signálu dochází totiž k deformacím píků, které jsou softwarem Syngistix nesprávně využívány jako přítomnost více částic menší velikosti. V této práci byl proto vyvinut vlastní software, umožňující variabilní definici míry deformace signálu nanočástic. Tím je dosaženo stavu, že i



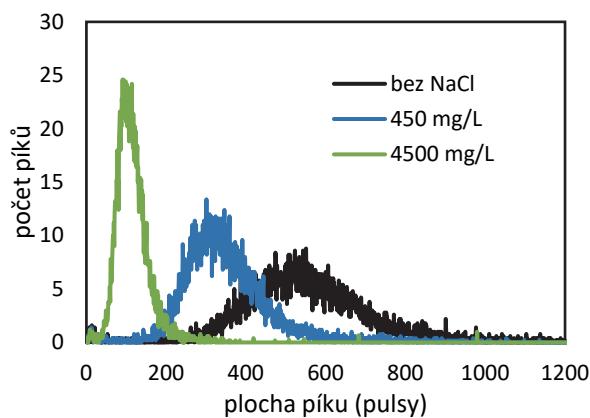
Obr. 1. Distribuce plochy píku pro 40 nm nanočástice stříbra při frekvenci snímání 100 000 Hz (A) a 10 000 Hz (B).
— vlastní software, — Syngistix

deformované signály nanočástic jsou vyhodnoceny správně a nedochází tak ke zkreslení výsledků (Obr. 1). Kromě toho je také dosaženo užší distribuce velikostí nanočástic. Popsané problémy pak nenastávají pouze při měření větších nanočástic stříbra (100 nm), kde je deformace píku poměrně malá i při vysoké frekvenci měření nebo při měření menších nanočástic s nízkou frekvencí snímání, čímž se ovšem popsáné výhody ztratí.

Druhá publikace je zaměřena na studium nespektrálních interferencí omezující aplikace metody sp-ICP-MS při analýze nanočástic v reálných vzorcích. V práci byly použity modelové roztoky nanočástic stříbra a arsenu, jejichž příprava byla pro účely této práce vyvinuta. Běžnou složkou biologických a environmentálních vzorků je chlorid sodný, který i při koncentraci 450 mg/l (20x zředěný fyziologický roztok) vede k podhodnocení průměru nanočastic o 7% v případě As a 15% v případě Ag ve srovnání s vodnou suspenzí (Obr. 2). U koncentrace 4500 mg/l je podhodnocení průměru nanočastic dokonce 28% v případě As a 41% v případě Ag, a kromě toho dochází také k podhodnocení číselné koncentrace o 9% ve srovnání s vodnou suspenzí. Analýza nanočastic metodou sp-ICP-MS v neředěných vzorcích jako např. krevní plasma či mořská voda tak vede k významnému zkreslení výsledků.

K opačnému jevu, tedy k nadhodnocení průměru nanočastic a číselné koncentrace dochází vlivem přítomnosti organických látek. V matrici 2% (v/v) methanolu simulující organické látky došlo k nadhodnocení průměru nanočastic Ag o 6% a As o 20% a současně k nadhodnocení číselné koncentrace nanočastic Ag o 17% a As o 10%. Nespektrální interference uhlíku a chloridu sodného tedy působí proti sobě, což může komplikovat měření v případě neznámých vzorků. Práce však umožňuje tyto efekty alespoň odhadnout a zvolit tak vhodné zpracování vzorků pro analýzu.

Predložené práce mapují některá omezení v dnešní době velmi populární metody sp-ICP-MS pro stanovení nanočastic a upozorňují na možná rizika, která mohou vést k neúmyslnému zkreslení výsledků měření.



Obr. 2. Distribuce plochy píku pro 100 nm nanočástice stříbra při různých koncentracích NaCl.

Optická a magnetooptická spektroskopie tenkých vrstev ferimagnetických granátů pro fotonické aplikace

RNDr. Lukáš Beran

Fyzikální ústav Univerzity Karlovy,
Oddělení optoelektroniky a magnetooptiky,
E-mail: beranlu@gmail.com

Seznam soutěžních prací:

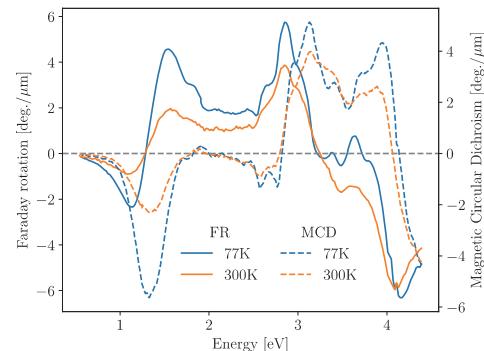
1. Onbasli, M. C. *et al.* Optical and magneto-optical behavior of Cerium Yttrium Iron Garnet thin films at wavelengths of 200-1770 nm. *Sci. Rep.* **6**, 1–10 (2016).
2. Lage, E. *et al.* Temperature-dependent faraday rotation and magnetization reorientation in cerium-substituted yttrium iron garnet thin films. *APL Mater.* **5**, (2017).
3. Zhang, Y. *et al.* Enhanced magneto-optical effect in Y_{1.5}Ce_{1.5}Fe₅O₁₂thin films deposited on silicon by pulsed laser deposition. *J. Alloys Compd.* **703**, 591–599 (2017).
4. Fakhru, T. *et al.* Magneto-Optical Bi:YIG Films with High Figure of Merit for Nonreciprocal Photonics. *Adv. Opt. Mater.* **7**, 1900056 (2019).
5. Jesenska, E. *et al.* Optical and magneto-optical properties of Bi substituted yttrium iron garnets prepared by metal organic decomposition. *Opt. Mat. Expr.* **6**, 8041–8046 (2016).

Soubor prací je zaměřen na systematické studium a optimalizaci magnetooptických vlastností ferimagnetických granátů a jejich funkčních nanostruktur. V dnešní době jsou tyto materiály v popředí zájmu zejména díky jejich potenciálním aplikacím v integrované fotonice a spinové elektronice. Materiálové inženýrství se v poslední dekádě dokázalo přiblížit k výrobě integrovaného fotonického procesoru díky vývoji integrovaných laserů, fotodetektorů, filtrů, rezonátorů a modulátorů. V dnešní době se začínají objevovat první prototypy počítačových mikroprocesorů, jež využívají čistě optické komunikace mezi procesorem a operační pamětí. Tyto mikroprocesory vykazují znatelný nárůst rychlosti, avšak jejich funkčnost je zatím značně omezena. Správná funkce fotonického čipu závisí na potlačení nechtěných zpětných odrazů od optických komponent. V praxi tuto činnost zajišťují magnetooptické izolátory. Tato zařízení potlačují mnohonásobné odrazy mezi jednotlivými optickými komponentami, čímž snižují nároky na přesnost výrobních procesů a zvyšují efektivitu přenosu informace. Využívají k tomu magnetooptických jevů, při kterých dochází ke změně polarizačního stavu světla vlivem optické anizotropie, indukované v materiálu magnetickým polem. To vede k rozdílné absorpci v dopředném a zpětném směru šíření optické vlny. Jejich integrace na optický čip je ovšem velmi komplikovaná díky nekompatibilitě klasických magnetooptických materiálů s křemíkovou technologií. Klasické magnetooptické materiály (ferimagnetické granátové struktury) ve formě tenkých vrstev deponovaných na křemíkovém substrátu nevykazují potřebné magnetooptické vlastnosti nutné pro funkční integrovaný magnetooptický prvek. Je proto nutné nalézt nové postupy přípravy a systematicky studovat magnetooptickou odezvu v závislosti na podmírkách růstu tenkých vrstev magnetooptických granátů.

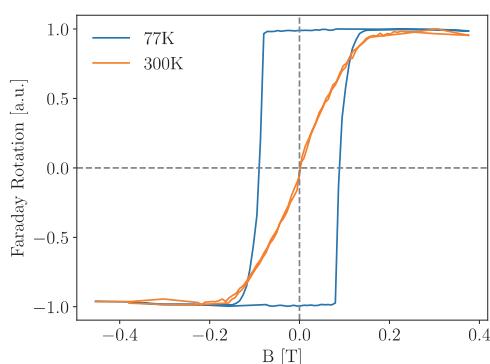
Při návrhu integrovaných fotonických struktur je navíc potřebná znalost kompletní optické a magnetoopické odezvy materiálu v co nejširším spektrálním rozsahu. Z tohoto důvodu se pro charakterizaci připravených vrstev využívá kombinace spektroskopické elipsometrie a magnetoopické spektroskopie. K měření spektrální závislosti magnetooptické odezvy byl využit vysoce přesný magnetooptický spektrometr spoluvyvinutý L. Beranem na Fyzikálním ústavu UK. Tento spektrometr využívá metody rotujícího analyzátoru a je schopen změřit stočení polarizační roviny světla s přesností vyšší než jeden milistupeň.

Prvním studovaným materiélem byl Ce dopovaný $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ (Ce:YIG)¹. V této studii byla demonstrována závislost optické a magnetooptické odezvy tohoto materiálu na volbě krystalografické orientace substrátu. Byl pozorován znatelný rozdíl v optické absorpci a amplitudě Faradayova magnetooptického jevu, a to především v infračervené oblasti, která je klíčová pro telekomunikaci. U vzorku s orientací (111) bylo dosaženo nejlepších optických i magnetooptických vlastností, které překonávají doposud publikované hodnoty pro tenké vrstvy (nejvyšší publikovaná hodnota magnetooptického výtěžku).

Dalším předmětem výzkumu byla teplotní závislost magnetooptických vlastností Ce:YIGu². V tomto případě byl zkoumán teplotní rozsah od 77 K do 300 K. Výsledky ukázaly nejen značný nárůst magnetooptické odezvy v celém spektrálním rozsahu směrem k nižším teplotám (Obr. 2.), ale také zásadní změnu magnetické anizotropie při přechodu přes 200 K (Obr. 3.). Měření strukturních vlastností ukázalo, že tato změna je spojená s rozdílnou tepelnou roztažností vrstvy a substrátu. Pod kritickou teplotou 200 K se rozdíl těchto roztažností vyrovná a snadná osa magnetizace se otočí ven z roviny vzorku.



Obr. 2. Spektrum Faradayova jevu tenké vrstvy Ce:YIGu při 77K a 300K



Obr. 3. Smyčka Faradayovy rotace Ce:YIGu při 77K a 300K ukazující reorientaci magnetické anizotropie.

stoupá výrazně rychleji. Z tohoto důvodu se tyto vzorky nejeví jako vhodné pro magnetooptické izolátory, ale vzhledem k vysoké magnetooptické odezvě je možné jejich využití například v magnetooptické holografii. Vzhledem k vyšší optické absorpcí Ce:YIGu v infračervené oblasti byl jako další materiál zvolen Bi dopovaný $Y_3Fe_5O_{12}$ (Bi:YIG). Jeho růstem na křemíku se proto zabývá druhá z uvedených studií. Experimentální výsledky jasně ukázaly výrazné zlepšení magnetooptické odezvy (srovnatelná s monokrystalickými vrstvami⁵) vzorků při použití krystalizačních vrstev. Navíc při vhodně zvolených parametrech růstu nedochází k tak zásadnímu růstu optické absorpce. Proto bylo dosaženo dosud nejvyšších hodnot magnetooptického výtěžku ferimagnetických granátů připravených na křemíkovém substrátu.

Další práce se zabývaly přípravou granátových vrstev na křemíkovém substrátu za pomocí různých přístupů^{3,4}. Na křemíku není z důvodu velkého rozdílu mřížkových konstant možné dosáhnout epitaxního růstu granátů. Z tohoto důvodu roste granát na křemíku ve formě amorfní vrstvy. Krystalické struktury lze dosáhnout následným žíháním, nicméně tento proces má výrazně lepší výsledky v přítomnosti krystalizační vrstvy $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$. První z uvedených studií se zabývala růstem Ce:YIGu a přímým účinkem koncentrace céru. Tato měření ukázala, že magnetooptická odezva roste s přibývajícím dopantem, nicméně optická absorpcie, především v infračervené oblasti,



plynová chromatografie ICP-OES příprava vzorku
elementární ANALÝZA elektrochemie SEA
analýza povrchů separační techniky
DVS REOLOGIE ATOMOVÁ spektroskopie
GC temperace kapalinová chromatografie
UV-VIS spektrometrie **GC-MS** lyofilizátory
konfokál B.E.T. **LIMS** MIKROSKOPIE koncentrátory
CHNSO analýza AAS analýza částic HPLC
hmotnostní SPEKTROMETRIE centrifugy EXTRUZE
ICP-MS **SERVIS** termická analýza AIR monitoring
XPS widefield TEXTURA spotřební materiál **NMR**
DLS automatické dávkování iGC TOC analýza RVC

www.pragolab.cz





Chytrá cesta, jak neplýtvat časem
a získat správné výsledky

ICP-OES Spektrometry Agilent 5800 a 5900



5800 ICP-OES

- přístroj s chytrým softwarem, který Vám poskytne informace o vzorcích a umožní hned napoprve získat správné výsledky
- zahrnuje diagnostické nástroje pro automatické sledování dobré kondice ICP systému; přináší doporučující upozornění pro údržbu systému sloužící pro minimalizaci provozních prostojů
- nabízí možnost snížení provozních nákladů na plyny i díky argonu s čistotou jen 99,99%
- dvě dostupné konfigurace: vertikální hořák s dual view a vertikální hořák jen s radiálním pozorováním
- rozměrově nejmenší ze všech ICP-OES na trhu

5900 ICP-OES

Nabízí veškeré funkce jako model 5800, plus:

- umožňuje měření v axiálním i radiálním směru naráz - ze všech ICP-OES na trhu poskytuje nejrychleji přesné výsledky s poloviční spotřebou argonu na reálně změřený vzorek
- integrovaný sedmicestný přepínací ventil výrazně zkracuje čas nutný pro vnášení vzorku a proplachy

Chytré nástroje, které zabraňují zbytečným prostojům a opakovaným analýzám vzorků.
Chcete o nich vědět více? Kontaktujte nás!



💬 Jan Marek, produktový specialista

📞 +420 606 050 908

✉ jan.marek@hpst.cz

🌐 www.hpst.cz



Authorized
Distributor

FTIR A RAMANOVY SPEKTROMETRY A MIKROSKOPY



DLOUHÁ ŽIVOTNOST | VÝKONNOST | ŠIROKÁ NABÍDKA PŘÍSLUŠENSTVÍ | JEDNODUCHÁ OBSLUHA

FT-IR spektrometry a mikroskopy pro nejrůznější aplikace od R&D až po rutinní práci

ALPHA II



INVENIO s mikroskopem
Hyperion 2000



VERTEX 80v



LUMOS II



Kompletní sortiment Ramanových přístrojů od handheldu až po pokročilý R&D mikroskop

MultiRAM



SENTERRA II



BRAVO



NOVÉ PŘÍSTROJE Z PORTFOLIA

INVENIO

Perfektní volba pro rutinní i pokročilé výzkumné aplikace

- Moderní FTIR spektrometr pro farmaci, průmysl i výzkum
- Možnost přesné konfigurace s ohledem na využití
- Možnost automatizovaného multispektrálního měření (FIR, MIR, NIR)

INVENIO



LUMOS II

Revoluce v infračervené mikroskopii

- Extrémně rychlý chemický imaging (900 spekter/s)
- Unikátní prostorové rozlišení až 1,25 µm
- Citlivé detektory bez nutnosti chlazení kapalným dusíkem
- Plně automatizované měření

LUMOS II



SPECTRO CS s.r.o.

Certifikace dle ISO 9001: 2009, Certifikát TÜV SÜD Czech číslo: 05.094.716-1
 Rudná 1361/51, 700 30 Ostrava – Zábřeh, Tel: +420 596 762 840, Fax: +420 596 762 849, info@spectro.cz, www.spectro.cz



specialisté v oboru spektrometrie nabízejí přístroje firem:

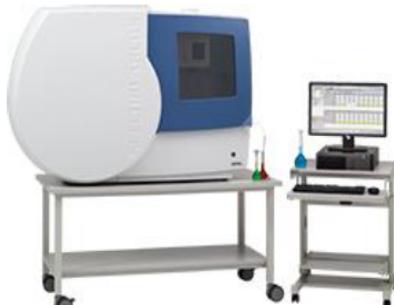


Ruční a mobilní spektrometry	Jiskrové spektrometry	ED - RTG spektrometry	ICP-OES spektrometry	ICP-MS spektrometry	Příprava materiálu pro RTG
Analyza v terénu, RTG a jiskrové/obloukové přístroje	Analyza kovových materiálů	Analyza pevných, kapalných a práškových materiálů	Analýza roztoků pro ultra nízké limity detekce	Plně simulovaný MS spektrometr	Tavičky, lisy, mlýnky, spotřební a referenční materiály pro XRF
Referenční materiály	Automatické systémy	GD spektrometry	Analýzatory otěžových kovů	Ruční IČ spektrometry	Analýzatory častic
Referenční materiály všeho druhu od firmy MBH	Kontejnerová laboratoř na klíč od firmy FLSmith	Hloubková analýza materiálu Distribuce prvků dle hloubky	Přístroje pro prediktivní údržbu pomocí analýzy olejů a maziv - kompletní zařízení pro tribotechnickou analýzu - na požadání zašleme podrobné informace		

Zastoupení na Slovensku: **SPECTRO APS spol. s r.o.**, Izabela Textorisovej 13, 036 01 Martin, www.spectroaps.sk

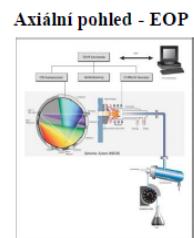
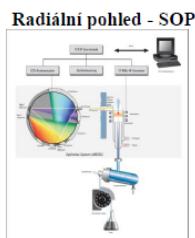
ICP spektrometr **SPECTRO ARCOS**

Vlajková lod' firmy SPECTRO



Jedná se o nový model (2015) ICP spektrometu, který je nástupcem velice úspěšného původního ICP spektrometu **SPECTRO ARCOS**, jenž se osvědčil zejména při analýze těžkých a komplikovaných matric (podle sloganu „tam kde ostatní končí, my začínáme...“).

Přístroj se vyrábí jak s axiálním, tak s radiálním snímáním plasmy:



a nově i v provedení **MULTI VIEW**.

MULTI VIEW je systém s kombinací axiálního a radiálního pohledu, který na rozdíl od systému **DUAL VIEW** nabízí oba pohledy v plnoodnodné kvalitě. Přístroj s **DUAL VIEW** je v podstatě vždy zařízení s axiálním pozorováním doplněné o radiální pohled, který však nemá nejlepší parametry. Naproti tomu náš systém **MULTI VIEW** vám skutečně nabízí dva plnoodnodné přístroje v jednom. Tim si zajistíte neomezené možnosti jeho použití v široké škále aplikací, od pitných vod přes matrice půd, každé až po složité analýzy kovových vzorků, zasolených roztoků, skla, drahých kovů atd.

Přístroj je ovládán přijemným analytickým SW, analýza je rychlá (sken za 3 sekundy) nezávislá na počtu zvolených čar a prvků při velmi dobrém stabilním rozlišení. Provoz spektrometru je velmi ekonomický bez nároku na další spotřebu argonu, klimatizaci laboratoře, externí chlazení vodou apod.

Díky tomu, že spektrometr umožňuje simultánní měření a zpracování tranzientního signálu (závislost intenzity na čase) pro libovolný počet čar a prvků, je vhodný pro spojení se vstupním vnášecím zařízením pro rychlé děje jako je laserová ablace, elektrotermická vaporizace (ETV) apod., a tím poskytuje možnost analyzovat mikromnožství pevných vzorků bez nutnosti převádění do roztoku!

ETV jako příslušenství k ICP ARCOs:



NABÍDKA PUBLIKACÍ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JMM

2. Podzimní škola rentgenové mikroanalýzy 2012 - sborník přednášek na CD	199,- Kč
Škola luminiscenční spektrometrie 2011 - sborník přednášek na CD	199,- Kč
Podzimní škola rentgenové mikroanalýzy 2010, sborník přednášek na CD	199,- Kč
Inorganic Environmental Analysis	161,- Kč
Referenční materiály (přednášky)	93,- Kč
Názvosloví IUPAC (Part XII: Terms related to electrothermal atomization; Part XIII: Terms related to chemical vapour generation)	35,- Kč
Kurz ICP pro pokročilé	245,- Kč
5. kurz ICP spektrometrie 2009	350,- Kč
6. kurz ICP spektrometrie 2011	350,- Kč
Kurz AAS pro pokročilé (1996)	120,- Kč
Metodická příručka pro uživatele FTIR	149,- Kč
Skripta Kurz HPLC/MS (2001)	100,- Kč
12. Spektroskopická konference	190,- Kč
13. Spektroskopická konference (2007 Lednice)	130,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '03	62,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '04	78,- Kč
AAS II – kurz pro pokročilé (2006)	435,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '05	126,- Kč

Spektroskopická společnost Jana Marka Marci

se sídlem: Ke Karlovu 2027/3, 120 00 Praha 2 - Nové Město e-mail: immss@spektroskopie.cz
<http://www.spektroskopie.cz>

Adresa pro zasílání korespondence: Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2,
611 37 Brno

Adresa sekretariátu pro osobní kontakt: Univerzitní kampus Bohunice, pavilon A14

Úřední hodiny: úterý 10 – 12 h, čtvrtek 10 – 12 h

Telefon: 549 49 1436, fax: 549 49 2494, mobil: 722 554 326, tajemník Tomáš Vašina

redakční rada:

prof. RNDr. Josef Komárek, DrSc. (předseda)

prof. Ing. Josef Čáslavský, CSc., prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc.

tech. redakce: Mgr. Rostislav Červenka, Ph.D.

redakční uzávěrka: 7. 1. 2020

uzávěrka příštího čísla: 15. 4. 2020