

Oponentní posudek dizertační práce pana RNDr. Jani Jabloňků *Plasmonic biosensing on the microscale and nanoscale*

Školitel: Prof. Ing. Jirí Homola, CSc., DSc., ÚFE AV ČR.

Tématem předložené dizertační práce je perspektivní problematika optických senzorů na bázi rezonančního jevu povrchových plazmonů (SPR), založenou na monitorování změn indexu lomu, zejména pro biologickou a chemickou charakterizaci látek a materiálů v aplikační oblasti. Téma práce, jak i z názvu vyplývá, by mělo být zaměřeno na problematiku možné miniaturizace těchto senzorů, na úroveň mikrometrickou, případně i nanometrickou. Práce se přitom věnuje jak teoretickému, tak i experimentálnímu studiu takovýchto senzorů, konkrétně pak zejména jednak možnostem miniaturizace detekčních oblastí v SPR senzorech pro jednotlivé i vícenásobné detekční vlnové délky, jednak experimentální charakterizaci senzorových struktur složených z nanočástic, na bázi lokalizovaných povrchových plazmonů (SP), jakož i teoretickým studiím – numerickým polí plazmonických nanostruktur, jako podpora experimentální realizaci, charakterizaci a testování. Ačkoliv jsou idea využití rezonancí povrchových plazmonů pro monitorování změn indexu lomu (a tedy obecně pro sensoriku) i první praktické realizace známy již delší dobu, jedná se o problematiku vzhledem k silnému aplikačnímu potenciálu stále vysoce aktuální a perspektivní, v tomto ohledu je tedy aktuální i téma dizertační práce. Pro vlastní práci byl tedy vybrán jako perspektivní přístup pomocí lokalizovaných povrchových plazmonů, resp. jejich kombinací se šířícími se SP. Práce však představuje poněkud nesourodou kombinaci několika dílčích aspektů, chyběla mi zde, i přes snahu o její nalezení, jakási hlubší sjednocující linie. Numerické techniky jsou v práci reprezentovány nástrojem založeným na metodě konečných diferencí v časové doméně (FDTD).

Posuzovaná dizertační práce má 31 stran, obsahuje 21 obrázků, odkazů na literaturu je uvedeno 71. Pro její formu bylo zvoleno shrnutí, respektive komentář spolu se souborem přiložených autorčiných publikací ve formě separátů (zvoleno 6 publikačních výstupů). Autorka v rámci dizertace (do roku 2014) publikovala, alespoň jak je doloženo v textu práce, pět článků publikovaných v časopisech s impaktním faktorem (ve dvou případech pak byla první autorkou), a to *Plasmonics*, *Optics Letters*, *Analytical Chemistry*, 2× *Optics Express*, spolu s jedním konferenčním příspěvkem (na konferenci Europt(r)ode - Conference on Optical Chemical Sensors and Biosensors v roce 2012). Tyto články jsou přiloženy k dizertaci a tvoří její součást (bohužel, zřejmě při tisku a vazbě poslední článek VI byl opomenut, byl však velmi ochotně poskytnut následně). Text práce je členěn do sedmi hlavních kapitol. První kapitola je věnována úvodu (Introduction) do problematiky, šířivým a lokalizovaným povrchovým plazmonům, jakož i základům biosenzorů, krátce je také zmíněno modelování plazmonických struktur, pomocí metody FDTD. I když je tento stručný úvod vcelku dobře srozumitelný, uvítal bych zejména tuto část, věnující se simulacím plazmonických struktur, podrobnější a strukturovanější (jak je zřejmé, jednalo se o jednu z důležitých aktivit doktorandky), neboť se jedná o komplexní problematiku s komplementárními přístupy. Na základě tohoto úvodu do problematiky se další kapitola (po představení cílů dizertační práce) následně věnuje ve třech částech představení jednotlivých dosažených výsledků: v experimentální oblasti miniaturizaci detekční oblasti pro šířivé plazmony (část 3.1), studii plazmonických nanočástic jako platformy pro detekci založenou na lokalizovaných SP (část 3.2) a studii polí uspořádaných nanostruktur (Au nanotyčky) pro minimalizaci detekční oblasti řádově na nanometrovou úroveň. Samotný textový komentář je zakončen závěrem, seznamem použitých zkratk, přehledem literatury (71 položek) a seznamem dodatků (ve formě přiložených plných textů článků, resp. jednoho posteru).

Po formální stránce je práce zpracována na standardní úrovni, přitom text je psán stručně, někdy možná až příliš (rozsah textu 31 stran - viz poznámka výše o užitečnosti podrobnějšího popisu, alespoň v některých oblastech). Co se týče formální i stylistické úrovně anglického jazyka, v němž je práce napsána, pokud mohu posoudit, je na velmi solidní úrovni, překlepů a formálních chyb práce obsahuje poměrně malé množství, jsou navíc nepodstatného, drobného charakteru. Využití obrázků, grafů a tabulek je vcelku adekvátní a efektivní, i když jsou často převzaty přímo z doprovodných článků, v úvodu bych možná více uvítal také přehledová srovnání a ilustrační obrázky. Pokud se týká terminologie, nenašel jsem problematické či nesprávné použití, snahou autorky je nově používané termíny definovat, i když v daném kontextu by bylo častěji vhodné i podrobnější vysvětlení.

Jelikož mi nejsou známy další aktivity (včetně dalších publikací) autorky v oblasti plazmonického biosenzorování, otázkou je vhodnost volby struktury vlastní práce, sice kombinující dílčí experimentální aktivity (viz přiložené články I, II a poster III, částečně též článek IV, kde se ovšem jedná o aktivity v oblasti charakterizace struktur) a teoretických (FDTD) simulací (články V a VI), které slouží jako doprovodné pro komplexnější experimentální aktivity dalších kolegů v rámci pracoviště, kde byla práce prováděna. I když jsou tedy dopady této práce ve formě konkrétních dílčích výsledků zřejmé, mám pocit, že jim poněkud chybí sjednocující prvek, spolu se vzájemným propojením, nadhledem a širšími souvislostmi (viz též některé mé dotazy). Z odborného hlediska považuji práci nicméně za užitečnou a splňující jistě minimální kritéria pro takovýto typ práce. Dizertantka dle mého názoru zvládla danou problematiku v uvedených dílčích oblastech, bude tak zřejmě schopna další vlastní tvůrčí práce, pokud by se rozhodla se jí i nadále věnovat.

Tato předložená dizertační práce přináší pochopitelně řadu podnětů a dotazů pro diskuzi, zde bych si dovolil následující dotazy a připomínky, dle časových možností v rámci obhajoby.

- 1) Zajímalo by mne, zda je technika, umožňující lokalizaci detekční oblasti (viz část 3.1 v textu práce, resp. doprovodné články I a II) jak na jedné vlnové délce, tak na více vlnových délkách, dále využívána? Byla by možné ještě další minimalizace detekční oblasti?
- 2) Jako jeden z cílů dizertace je uvedena teoretická analýza plazmonických nanostruktur, zejména pomocí počítačových simulací. Pokud jsem dobře postřehl, alespoň v textu práce, toto se týkalo pouze analýzy pravidelných rektangulárních polí kovových (Au) nanotyčinek. Zajímalo by mne, zda se uchazečka zabývala i dalšími strukturami, resp. se pokoušela o jejich srovnání, právě s využitím počítačových simulací.
- 3) V návaznosti, pokud se tak nestane již v rámci prezentace při obhajobě, poprosil bych o bližší komentář k tzv. Fanovým rezonancím, které jsou hojně v této souvislosti, nejen jako užitečný koncept, ale i z praktického hlediska využívány. V praxi tyto často bývají zaměňovány s rezonancemi danými pravidelným uspořádáním (tzv. *surface lattice resonances*), resp. s tzv. Rayleighovými rezonancemi (souvisejícími s přechodem evanescentních difrakčních řádů na reálné). Jaká byla situace ve vašem případě?
- 4) Mohla by doktorandka komentovat, co bylo důvodem volby FDTD metody pro simulace polí plazmonických senzorových nanostruktur. Byly uvažovány i jiné alternativní metody, např. velmi efektivní metoda FMM (Fourierova modální metoda, apod.), resp. metoda hraničních prvků (BEM).
- 5) Jaké byly důvody volby využití výpočetního klastru, při použití FDTD metody? Nestačilo by pro simulaci uvažovat strukturu jako periodickou s periodickými okrajovými podmínkami? Zajímaly by mne také praktické zkušenosti s výpočty (doba a přesnost výpočtu, konvergence, zefektivnění výpočtů v závislosti na počtu procesorů, atd.).
- 6) Zajímalo by mne dále, viz článek - Příloha VI, bližší komentář k problému dekonvoluce lokální citlivosti, diskutovaný v článku v části 4. Co tato dekonvoluce vlastně znamenala (proč bylo nutné ji provádět) a jak se prováděla?
- 7) K témuž článku bych měl ještě dotaz, zda by bylo možno blíže komentovat (viz obr. 20 na straně 24), jaký byl rozdíl (jak experiment, tak teorie) mezi jednotlivými třemi případy polí plazmonických nanočástic (nepovrstvené, částečně a plně povrstvené).
- 8) Konečně, zajímalo by mne, jaká případná další komplexnější uspořádání (periodická, resp. náhodná) plazmonických nanostruktur by mohla, z jejího pohledu, přinést případná vylepšení pro využití v senzorech?

Závěr: Předloženou dizertační práci je možno hodnotit jako splňující požadavky na takovou práci kladené, i když její skladba a průběh, jakož i volba příložených vědeckých článků by mohly být diskutabilní. Nicméně, z odborného hlediska byly výsledky doloženy publikacemi, uvedené dotazy a připomínky budou jistě také uspokojivě zodpovězeny. Cílů dizertační práce se tak ve vybraných oblastech (dokumentovaných příloženými publikacemi) podařilo dosáhnout, je ovšem škoda, že doktorandka nepokračovala plynule ve své vědecké práci až do současnosti. Práce přináší dílčí nové poznatky (i když poněkud nesourodě, bez širšího nadhledu a propojení, uspořádané) a je pro výzkum v oblasti moderní SPR sensoriky jistě přínosná.

Závěrem mohu prohlásit, že předložená dizertační práce, i přes výše zmíněné kritické poznámky a komentáře, splňuje dle mého názoru minimálním způsobem požadavky na dizertační práce kladené příslušnými právními předpisy. Práci proto doporučuji k obhajobě pro získání akademicko-vědeckého titulu PhD.

Ivan Richter

V Praze dne 18. září 2017

Doc. Ing. Ivan Richter, Dr.
České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
Katedra fyzikální elektroniky
Břehová 7, 115 19 Praha 1
Tel: 221912826
E-mail: ivan.richter@jfifi.cvut.cz