

## Rukověť molekulárního inženýra

aneb

stručný průvodce studijním oborem magisterského studia  
nově otevřeným na FCHI v zimním semestru 2007/08

**Molekulární inženýrství** je název oboru orientovaného do mikrosvěta, kde dominují zákonitosti kvantové mechaniky. Je zaměřený na jedné straně na strukturu molekul, podstatu chemické vazby a mezimolekulových interakcí a na straně druhé, na otázky spojené s možnostmi cílené tvorby molekulových systémů požadovaných vlastností a tvorby funkčních molekulárních zařízení o rozměrech jednotek nanometrů. Nezanedbatelná pozornost je věnována rovněž popisu jevů spojených s tvorbou objektů na atomární úrovni.

*„There is plenty of room at the bottom“* (tam dole je spousta místa) představuje dnes již klasický název přednášky prof. Feynmana (nositele Nobelovy ceny za fyziku (1965 za klíčové poznatky v kvantové elektrodynamice)), kterou přednesl na konci roku 1959 na výročním setkání Americké fyzikální společnosti, jako jeden z prvních vědců zabývajících se technologickými možnostmi na molekulární a atomární úrovni ([www.zyvex.com](http://www.zyvex.com)). Od jeho přednášky již uběhlo téměř půl století a během této doby došlo k výraznému technologickému vývoji, který umožnil rozvoj cílené tvorby molekulárních systémů, vývoj řady nanotechnologií a jejich rozšíření do řady praktických aplikací.

Molekulární inženýrství ve smyslu nanotechnologií představuje jiný přístup k tvorbě miniaturních zařízení než běžné postupy, jejímž cílem je maximální miniaturizace existujících součástek. Oproti této cestě „shora dolů“ představuje molekulární inženýrství cestu „zdola nahoru“, tedy postupnou tvorbu miniaturních zařízení po jednotlivých atomech nebo molekulách.

V roce 1989 se skupině kolem dr. Eiglera podařilo v laboratořích IBM vytvořit nanomanipulacemi logo této firmy z jednotlivých atomů xenonu. Nedošlo k tomu za zcela běžných laboratorních podmínek (s něčím co existuje při teplotě 77 K by jistě nebylo snadné dále pracovat), ale cesta od té doby zůstala otevřená.

Ve světě těchto rozměrů se však již uplatňují jevy, které nelze pozorovat v měřítku, na které jsme zvyklí. Pracujeme-li s jednotlivými atomy, ovlivňujeme tím jejich vlastnosti. Běžně lze pozorovat řadu jevů, které lze vysvětlit pouze kvantovou fyzikou – např. „tunelovací efekt“ při němž elektrony překonávají nepřekonatelné energetické bariéry – nebo jevy, které na vysvětlení teprve čekají – např. změna fyzikálních konstant jako je teplota tání nebo měrný elektrický odpor zlatého drátu tvořeného jednotlivými atomy.

Představíme-li si jednotlivé atomy a malé molekuly na jedné straně a mikrosoučástky na straně druhé (v dnešních mikroprocesorech jsou jednotlivé tranzistory leptány technologií 0,35  $\mu$  m) zůstává nám mezi tím určitý prostor, který však od 90. let minulého století není prázdný. Zaplnila ho supramolekulární chemie, obor organické chemie, který se zabývá tvorbou velkých molekul nebo jejich uspořádaných shluků, v nichž ne všechny vazby jsou kovalentní. Lze tak získat supramolekuly („nadmolekuly“) nebo částice zcela nových vlastností. Do této oblasti, za jejíž zakladatele se považují prof. Cram, Lehn a Pedersen, kteří obdrželi Nobelovu cenu v roce 1987 ([supramolecular chemistry](#)), patří rovněž metody umožňující tvorbu uspořádaných vrstev jednotlivých molekul na různých fázových rozhraních. Kromě zcela nových postupů se zde vědci snaží napodobit procesy probíhající v živých organizmech – např. tvorbu enzymů podle jednotlivých genů DNA.

Jiným příkladem molekulárního inženýrství je objev fullerenů, za který H. Kroto, R. Curl, and R. Smalley získali Nobelovu cenu v roce 1996. Manipulace s klasickými fullereny (jako např. slavný C<sub>60</sub> - fotbalový míč) vedly například k vytvoření cylindrických fullerenů – uhlíkových nanotrubiček, trubiček o šířce několika nanometrů a délce až několika milimetrů se zcela mimořádnými makroskopickými vlastnostmi (roztavitelnost, elektrická vodivost, tepelná resistance a chemická odolnost).

V současné době je známa celá řada manipulační technik, technologických postupů a metod vytváření monovrstev a speciálních tvarů v nanoměřítku, které se již dají používat při tvorbě nanosystémů. Velmi zjednodušeně lze říci, že základní součásti a postupy jsou již k dispozici a často zbývá jen nalézt konkrétní výrobní postupy pro konkrétní aplikace. Na druhé straně, byla pozorována řada jevů, která na vysvětlení a využití teprve čekají.

## Program studia

Studijní obor "Molekulární inženýrství" nově otevřený na VŠCHT jako navazující magisterský studijní program na FCHI poskytne studentům nezbytné teoretické a praktické znalosti, které je připraví na profesionální kariéru inženýra jednak v oblasti pokročilých technik mikro- a nanostrukturní chemie a elektrochemie, realizovaných na molekulární úrovni, jednak v oblastech molekulární fyzikální chemie a bioinženýrství.

**V prvním ročníku** se studenti seznámí s teoretickými základy chemie (s kvantovou chemií, chemickou fyzikou a molekulární fyzikální chemií), které jim zprostředkují teoretický náhled do celé problematiky. Při teoretických výkladech jednotlivých termínů bude brán zřetel na konkrétní využití popisovaných termínů nebo jevů, ať již při teoretickém modelování kvantově-chemickými výpočty, nebo při konkrétní práci s mikro- a nanoobjekty.

Budou probírány principy a využití jednotlivých molekulárně fyzikálních experimentálních metod (různé techniky moderních spektroskopií, mikroskopií, skenovacích technik apod.) a nových metod instrumentální chemické analýzy mikro- a nanoobjektů, které jsou nedílnou součástí celé problematiky, neboť umožňují zjistit zda bylo dosaženo požadovaného cíle. Řada těchto metod umožňuje nejenom zjistit, zda určitý fyzikální děj nebo zamýšlená chemická reakce skutečně probíhá a jaké jsou optické, elektrické nebo chemické vlastnosti vytvořeného objektu, ale také lze řadou těchto metod s mikro- a nanoobjekty přímo manipulovat (transport z místa na místo, jejich litografická modifikace apod.).

Vlastní volba povinně volitelných a volitelných předmětů (pro splnění požadovaného počtu kreditů potřebných pro zápis do vyššího ročníku) nabízí studentům příležitost vlastního profilování v této oblasti. Vybrat si lze předměty rozvíjející jak teoretické základy probrané problematiky, tak i předměty zaměřené na konkrétní aplikace v jednotlivých oblastech výzkumu.

Jelikož hlavním smyslem prvního ročníku je vytvoření solidního teoretického základu a získání širokého přehledu o moderních experimentálních metodách jednak pro potřeby dalších studií přímo v oblasti molekulárního inženýrství, tak i dalších oborů vycházejících z molekulární fyzikální chemie, je převážná část náplně studia **ve druhém ročníku** tvořena převážně předměty, které si studenti sami volí tak, aby nejlépe vyhovovaly jejich zájmu a zadání diplomové práce, a dále samozřejmě i samotnému vypracování diplomové práce.