

**ZAKŁAD OPTYKI**  
**TEMATY PRAC LICENCJACKICH DLA STUDENTÓW INDYWIDUALNYCH**  
**ROK AKADEMICKI 2016/2017**

**1. Badania reakcji chemicznych na granicy faz**

**Opiekun: dr hab. Piotr Fita**

Powierzchnie rozdzielające dwie fazy skondensowane stanowią środowisko wielu ważnych reakcji chemicznych. Na powierzchniach zachodzi na przykład tak powszechne zjawisko jak korozja, a wpływ na zachowanie komórek organizmów żywych mają procesy zachodzące na granicy błony komórkowej i środowiska. Również wiele reakcji o znaczeniu przemysłowym prowadzi się z udziałem niemieszających się substratów, kontaktujących się ze sobą jedynie na granicy faz. Wciąż jednak niewiele wiadomo o procesach zachodzących na granicy dwóch cieczy, bowiem dopiero niedawno możliwe stały się optyczne badania powierzchni cieczy, wykorzystujące zjawiska nieliniowe.

Celem pracy licencjackiej jest przeprowadzenie badań reakcji chemicznych zachodzących na granicy dwóch niemieszających się cieczy za pomocą technik optyki nieliniowej, wykorzystujących ultrakrótkie impulsy laserowe.

**2. Badania ultraszybkiej dynamiki procesów zachodzących w cząsteczkach organicznych**

**Opiekun: dr hab. Piotr Fita**

Wiele reakcji chemicznych zachodzi pod wpływem światła – absorpcja fotonu przez reagujące cząsteczki dostarcza energii potrzebnej do zapoczątkowania procesów fotochemicznych, prowadzących np. do zmiany struktury lub powstania nowych cząsteczek. Poznanie tych procesów może pozwolić na kontrolowanie przebiegu reakcji, w szczególności reakcji prowadzących do zamiany energii świetlnej na energię chemiczną lub elektryczną i mogących stanowić podstawę działania metod terapeutycznych (terapia fotodynamiczna nowotworów) lub nowych źródeł energii (organiczne baterie słoneczne).

Procesy decydujące o przebiegu tych reakcji często zachodzą w czasach rzędu femto - i pikosekund, dlatego wymagane są specjalne metody ich badania, w których wykorzystuje się źródła ultrakrótkich impulsów laserowych. W metodach tych próbkę cząsteczek chemicznych wzbudza się impulsem światła o czasie trwania rzędu 100 fs, a inny impuls, opóźniony w stosunku do pierwszego, monitoruje przebieg procesu. Zmieniając odstęp czasu pomiędzy impulsami w przedziale od zera do kilkuset pikosekund można odtworzyć przebieg badanej reakcji.

Celem pracy licencjackiej jest zbudowanie układu pomiarowego do badania procesów zachodzących w cząsteczkach organicznych oraz jego wykorzystanie np. do śledzenia dynamiki protonów w podwójnej studni potencjału lub przeniesienia elektronu w układach organicznych.

### **3. Optyczny mikroskop skanujący**

**Opiekun: dr hab. Piotr Fita**

W optycznych mikroskopach o najwyższej rozdzielczości wykorzystuje się silnie zogniskowaną wiązkę światła laserowego (lub kilka wiązek), która za pomocą urządzenia skanującego przemiatana jest przez obrazowaną próbkę. Czuły detektor punktowy rejestruje światło wyemitowane lub rozproszone na próbce. Dzięki wykorzystaniu różnych procesów prowadzących do emisji światła (fluorescencja wzbudzona jedno- lub dwufotonowo, generacja drugiej lub trzeciej harmonicznej) lub jego rozpraszania (np. rozpraszanie Ramana) możliwe jest badanie różnych własności próbki z rozdzielczością przestrzenną.

Celem pracy magisterskiej jest zbudowanie i scharakteryzowanie mikroskopu skanującego pracującego w trybie zbierania fluorescencji lub generacji drugiej harmonicznej i wykorzystanie go np. do obrazowania nanocząstek lub materiałów biologicznych.

### **4. Konstrukcja elektronicznej aparatury pomiarowej**

**Opiekun: dr hab. Piotr Fita**

W ostatnich latach powstało wiele otwartych platform umożliwiających łatwe wykorzystanie nowoczesnej technologii mikroprocesorowej oraz programowalnych układów cyfrowych. Na platformy te składają się gotowe płytki elektroniczne z układami programowalnymi wprost z komputera PC i bezpośrednio dostępnymi portami wejścia/wyjścia a także środowiska umożliwiające ich programowanie w języku wysokiego poziomu (np. C). Zakres dostępnych urządzeń rozciąga się od układów wykorzystujących małe mikrokontrolery po komputery o dużej mocy obliczeniowej oraz złożone układy logiki programowalnej (FPGA). Niska cena tych urządzeń oraz bardzo obszerna baza już gotowych rozwiązań udostępnionych przez skupione wokół tych platform środowisko pozwala w łatwy i tani sposób wykorzystywać je w laboratoriach badawczych, zastępując wielokrotnie bardziej kosztowne i mniej elastyczne rozwiązania komercyjne.

Celem pracy licencjackiej jest skonstruowanie i oprogramowanie kontrolera aparatury optycznej (np. spektrometru, stabilizatora temperatury) lub urządzenia do akwizycji danych i obróbki cyfrowej sygnału oraz wykorzystanie go do budowy układu doświadczalnego.

### **5. Modelowanie wzmocnienia emisji spontanicznej w laserze ultraszybkim**

**Opiekun: dr Tomasz Kardaś, prof. Czesław Radzewicz**

We wnętrzu ultraszybkiego lasera ultrakrótki impuls światła okresowo przebiega przez ośrodek laserowy. Co dzieje się w podczas jego nieobecności? W ośrodku rośnie

populacja stanów wzbudzonych i następuje wzmacnianie fotonów emisji spontanicznej.

Praca polegać będzie na implementacji modelu ośrodka laserowego opartego o znane równania różniczkowe cząstkowe oraz wykonaniu obliczeń dla współczesnych laserów światłowodowych opartych na szkłe domieszkowanym iterbem.

## **6. Propagacja impulsów poza przybliżeniem przyosiowym**

**Opiekun: dr Tomasz Kardaś, prof. Czesław Radzewicz**

Przy generacji splątanych par fotonów, w procesie wzmacniania parametrycznego i przy sumowaniu częstości stosowane są konfiguracje doświadczalne, gdzie oddziałują ze sobą niewspółosiowo poruszające się wiązki światła. Oddziaływania te dobrze opisuje rozwijany w Zakładzie Optyki model propagacji impulsów. Dla wiązek poruszających się względem siebie pod dużym kątem załamuje się stosowane w obecnym modelu przybliżenie przyosiowe.

Praca polegać będzie na zaimplementowaniu poprawki pozwalającej na wyjście poza przybliżenie przyosiowe i jej integrację z istniejącym modelem. Mile widziana znajomość języka Matlab.

## **7. Wykorzystanie kwantowej interferencji w rekonstrukcji czasowo-widmowego stanu kwantowego jednofotonowych impulsów światła.**

**Opiekun: dr Michał Karpiński**

Kodowanie informacji kwantowej w czasowo-widmowym stopniu swobody pojedynczych fotonów i splątanych par fotonów jest interesujące z punktu widzenia kwantowej komunikacji światłowodowej oraz kwanotwej optyki zintegrowanej. Wykorzystanie tego stopnia swobody wymaga rozwoju metod pełnej charakteryzacji czasowo-widmowego stanu kwantowego pojedynczych fotonów. Celem pracy będzie zbudowanie układu eksperymentalnego, wykorzystującego interferencję Hong-Ou-Mandla w połączeniu z przesunięciami widmowymi, do pomiaru widmowej funkcji falowej i/lub widmowej macierzy gęstości jednofotnowych impulsów światła. Możliwe jest rozszerzenie projektu do charakteryzacji splątanych par fotonów.

Podczas pracy student zapozna się z eksperymentalnymi technikami optyki kwantowej oraz z algorytmami rekonstrukcji stanu kwantowego z danych doświadczalnych.

## **8. Fotoasocjacja ultrazimnych atomów i jej zastosowania**

**Opiekun: prof. dr hab. Paweł Kowalczyk, dr Mariusz Semczuk**

Fotoasocjacja stała się w ostatnich latach potężnym narzędziem służącym do wytwarzania ultrazimnych cząsteczek dwuatomowych, homo i heterojądrowych, w wybranych stanach energetycznych, w tym również w absolutnym stanie podstawowym. Tematem pracy będzie wyjaśnienie podstaw fizycznych metody fotoasocjacji i omówienie możliwości jej zastosowań, zarówno bezpośrednich (np. w spektroskopii wysokiej zdolności rozdzielczej), jak i pośrednich (jako przygotowanie do dalszych eksperymentów, np. z dziedziny tzw. zimnej chemii lub informatyki kwantowej). Celem pracy będzie zapoznanie się z najnowszymi eksperymentami z ultrazimnymi cząsteczkami tworzonymi metodą fotoasocjacji, jak również zaletami i ograniczeniami tej metody w porównaniu do metod komplementarnych (np. magnetoasocjacji). Obecnie w naszym laboratorium przygotowywane są doświadczenia nad "zimną materią". Student, który wykaże się zaangażowaniem i znajomością tematu, będzie miał możliwość włączenia się w aktualnie prowadzone i zakrojone na szeroką skalę prace, mające na celu zbudowanie układu pozwalającego w pierwszym etapie na pułapkowanie dwóch rodzajów atomów metali alkalicznych w nakrywających się pułapkach magnetoptycznych (MOT). Następnym krokiem będzie fotoasocjacja oraz przejęcie kontroli nad stanami energetycznymi wytwarzanych cząsteczek. Stwarza to doskonałą możliwość kontynuowania prac badawczych w czasie studiów magisterskich i doktoranckich.

## **9. Spektroskopia laserowa dwuatomowych cząsteczek metali alkalicznych**

**Opiekun: prof. dr hab. Paweł Kowalczyk**

Przedmiotem pracy będzie wyznaczenie, na podstawie obserwowanych doświadczalnie widm wzbudzenia cząsteczek, tzw. stałych cząsteczkowych (energii wzbudzenia, częstości oscylacji i rotacji cząsteczki, odległości między jądrami) oraz zależności energii chmury elektronowej od odległości międzyjądrowej dla jednej z dwuatomowych cząsteczek metali alkalicznych badanych w Zakładzie Optyki. Wielkości takie mają podstawowe znaczenie dla przewidywania przebiegu szeregu procesów fizycznych, między innymi laserowego chłodzenia i pułapkowania atomów oraz tworzenia z nich ultrazimnych molekuł. Są też istotne dla testowania wyników obliczeń teoretycznych struktury energetycznej cząsteczek, prowadzonych metodami chemii kwantowej. Przewidujemy możliwość włączenia się studenta w aktualnie prowadzone prace doświadczone – obserwację widm wzbudzenia cząsteczek techniką laserowej spektroskopii polaryzacyjnej. W Laboratorium Badań Molekularnych badamy cząsteczki dwuatomowe, obserwując ich widma optyczne nowoczesnymi metodami spektroskopii laserowej. Zajmujemy się przede wszystkim cząsteczkami metali alkalicznych (np.  $\text{Na}_2$ ,  $\text{NaLi}$ ,  $\text{KLi}$ ,  $\text{NaRb}$ ,  $\text{LiCs}$ ,  $\text{NaCs}$ ), które są szczególnie ciekawe i dla eksperymentatorów, i dla teoretyków. Jako najprostsze cząsteczki dwuatomowe po cząsteczce wodoru są to doskonałe obiekty do rozwijania teoretycznych metod chemii kwantowej – nasze wyniki doświadczone są więc nieodzowne do testowania poprawności modeli teoretycznych. Z drugiej strony, osiągnięta w ostatnich latach kondensacja Bosego-Einsteina w parach metali alkalicznych, oraz prace nad tworzeniem ultrazimnych cząsteczek i nad kondensatem molekularnym, stwarzają duże zapotrzebowanie na dokładne dane spektroskopowe dotyczące cząsteczek metali alkalicznych – takich danych dostarczają nasze doświadczenia. Na podstawie obserwowanych widm

umiemy wyznaczyć odległość jąder w cząsteczce, częstość ich drgań, częstość obrotów cząsteczki, a przede wszystkim zależność siły oddziaływania atomów tworzących cząsteczkę od ich odległości. Wszystkie te wiadomości zawarte są w tzw. krzywej energii potencjalnej, charakteryzującej dany stan cząsteczki. Krzywa ta z jednej strony obrazuje zależność energii oddziaływania atomów tworzących cząsteczkę od odległości między nimi, z drugiej przedstawia jamę potencjału, w której drgają jądra składowych atomów. Wyznaczenie kształtu takich krzywych jest głównym celem naszych doświadczeń.

## **10. Kamery ze wzmacniaczem obrazu i ich zastosowanie w optyce (kwantowej)**

**Opiekun: dr Radosław Łapkiewicz**

W ostatnich latach szybki rozwój technologii umożliwił wkroczenie optyki (kwantowej) na nowy obszar. Kamery czułe na pojedyncze fotony z nanosekundową rozdzielczością czasową umożliwiają rejestrację par fotonów z rozdzielczością przestrzenną. To z kolei pozwala na łączenie efektów kwantowych z obrazowaniem i spektroskopią.

Celem projektu jest uruchomienie, charakteryzacja i wykorzystanie układu detekcji par fotonów z rozdzielczością przestrzenną i nanosekundową rozdzielczością czasową opartego na nowym rodzaju kamery ze wzmacniaczem obrazu. Wymagana będzie także optymalizacja źródła par fotonów do testów kamery. Źródło par fotonów oparte będzie na procesie spontanicznego parametrycznego podziału częstości. Podobne źródła były w ostatnich dekadach wykorzystywane w licznych eksperymentach z optyki i informacji kwantowej.

Wymagam wytrwałości w pracy laboratoryjnej i zrozumienia podstaw optyki kwantowej. Oferuję pracę z najnowocześniejszym (nawet jeszcze niedostępnym komercyjnie) sprzętem dostosowanym do szybkiej detekcji fotonów z rozdzielczością przestrzenną, uczestnictwo w ambitnym projekcie badawczym i możliwość opanowania wielu technik doświadczalnej optyki (kwantowej).

## **11. Budowa ultrajasnego źródła par splątanych fotonów**

**Opiekun: dr Radosław Łapkiewicz**

W procesie spontanicznego parametrycznego podziału częstości (ang. spontaneous parametric down conversion, SPDC) fotony są emitowane w parach. Suma energii dwóch fotonów z pary jest równa energii fotonu pompy, co oznacza, że przy wąskopasmowej pompie, suma energii jest dobrze zdefiniowana. Dodatkowo, fotony z jednej pary są skorelowane w czasie, a czas korelacji dany jest przez ich czas spójności, który może być bardzo krótki. Umożliwia to efektywną absorpcję dwufotonową przy niskich natężeniach.

W ramach projektu zostanie zaprojektowane, zbudowane i scharakteryzowane źródło SPDC o możliwie największej jasności, co w dalszych częściach projektu

(wykraczających poza pracę licencjacką) umożliwi obserwację procesów nieliniowych z udziałem splątanych fotonów. Źródło będzie pompowane laserem pracy ciągłej o wąskim widmie, a kryształy będą dobrane do szerokowidmowego podziału częstości. W konsekwencji, otrzymamy bardzo wąską antykorelację energii i fotonów z par (o szerokości danej przez szerokość widma lasera pompującego) i wąską korelację w czasie (daną przez czas spójności pojedynczych fotonów z par).

Wymagam wytrwałości w pracy laboratoryjnej i zrozumienia podstaw optyki kwantowej. Oferuję uczestnictwo w ambitnym projekcie badawczym i możliwość opanowania najnowszych technik optyki.

## **12. Macierz światłowodów jednomodowych do chłodzenia laserowego ultrazimnych mieszanin.**

**Opiekun: dr Mariusz Semczuk**

Wiązki laserowe używane w eksperymentach z ultrazimnymi atomami najczęściej wytwarzane są w fizycznie odseparowanych lokalizacjach i następnie muszą zostać pokryte przestrzenie w obszarze, gdzie znajdują się atomy. W wielu eksperymentach konieczne jest pokrycie przestrzenne wiązek o długościach fal różniących się o zaledwie 1 pikometr (np. pracując z mieszaninami izotopowymi) przy jednoczesnym zapewnieniu jednakowej polaryzacji wszystkich wiązek i minimalizacji strat mocy. Wymogi powyższe uniemożliwiają wykorzystanie luster dichroicznych czy elementów polaryzacyjnych. Celem pracy będzie zbudowanie macierzy składającej się z 2-10 światłowodów jednomodowych zachowujących polaryzację, to jest konstrukcja urządzenia podobnego do komercyjnie dostępnych macierzy używających światłowodów wielomodowych. Konieczne będzie opracowanie metody orientacji i trwałego połączenia światłowodów tak, by ich osie optyczne były równoległe. Po dodaniu soczewki kolimującej wiązki opuszczające światłowody, powstałe urządzenie będzie kompatybilne ze standardowymi uchwytami optomechanicznymi. Mimo małego przesunięcia środków poszczególnych, skolimowanych wiązek nie stanowi to ograniczenia w typowych eksperymentach używających wiązek o średnicy rzędu 1 cm. Metoda produkcji i protokół testowy powinny być opracowane tak, by możliwe stało się łatwe wytwarzanie wielu układów tego rodzaju. Jest to praca typowo doświadczalna dla osoby, która nie boi się „pobrudzić sobie rąk” i jednocześnie jest zainteresowana zdobyciem doświadczenia w pracy z laserami, światłowodami, urządzeniami do detekcji promieniowania optycznego oraz chciałaby poznać podstawy optyki – doświadczenie takie jest bardzo przydatne np. w przemyśle optoelektronicznym. Potencjalna użyteczność tego typu urządzenia w fizyce eksperymentalnej jest bardzo duża, prawdopodobne jest zatem powstanie artykułu naukowego bazującego na wynikach pracy licencjackiej.

## **13. Zintegrowany układ modulatora akusto-optycznego z podwójnym przejściem.**

**Opiekun: dr Mariusz Semczuk**

Przesuwanie częstotliwości światła laserowego często opiera się na dyfrakcji światła w materiale, którego współczynnik załamania jest modulowany przez fale dźwiękowe. W efekcie światło np. w pierwszym rzędzie dyfrakcyjnym jest przesunięte o częstość fali dźwiękowej (rzędu 100 MHz) i opuszcza materiał pod pewnym kątem względem wiązki początkowej. Urządzenia wykorzystujące to zjawisko, tzw. modulatory akusto-optyczne, umożliwiają zatem kontrolowane przesuwanie częstości światła. Ceną za to jest jednak zmiana kierunku propagacji wiązki (gdyż kąt dyfrakcji ulega zmianie wraz ze zmianą częstości fali dźwiękowej). W wielu zastosowaniach wymagających sprzęgania światła do światłowodów konieczne jest jednocześnie przesuwanie częstości i utrzymanie stabilności kierunku propagacji wiązki, co osiąga się używając modulatorów akusto-optycznych w konfiguracji z podwójnym przejściem. Jednak takie rozwiązanie ma również wady, gdyż konfiguracja z podwójnym przejściem wymaga długich dróg optycznych, zajmując cenną przestrzeń w laboratorium. Wiąże się z tym także pewna niestabilność układu. W związku z tym rozwiązania takie są ograniczone niemal wyłącznie do warunków laboratoryjnych, w przeciwieństwie do układów z pojedynczym przejściem, które mogą być np. całkowicie oparte o światłowody, przez co są kompaktowe i mało wrażliwe na warunki zewnętrzne. Celem pracy będzie zbudowanie zintegrowanego układu modulatora akusto-optycznego z podwójnym przejściem, w którym drogi optyczne będą odpowiednio zakrzywione przy pomocy zwierciadeł, aby zminimalizować powierzchnię zajmowaną przez układ. Wązka wejściowa będzie pochodziła ze światłowodu jednomodowego. Do światłowodu tego typu sprzężona zostanie również wązka wyjściowa. Elementy optyczne będą rozmieszczone tak, by umożliwić miniaturyzację i uczynić układ jak najbardziej monolitycznym, przybliżając go do standardów oczekiwanych od urządzeń komercyjnych. Docelowo układ powinien pracować bez zakłóceń nawet gdy będzie potrząsany – w idealnym przypadku przejdzie testy na stole wibracyjnym. Tym samym możliwe będzie wykazanie jego użyteczności do układów mobilnych. Jeśli parametry zbudowanego układu sprostają oczekiwaniom, prawdopodobne jest powstanie artykułu opartego na przeprowadzonych badaniach. Dodatkowo, zostanie wtedy zbudowanych kilka takich urządzeń, które zostaną wykorzystane w układach laserowych w nowopowstającym laboratorium.

#### **14. Laser repompujący typu slave do chłodzenia laserowego i pułapkowania atomów cezu**

**Opiekun: dr Mariusz Semczuk**

Ze względu na duże rozszczepienie struktury nadsubtelnej poziomu  $6^2S_{1/2}$  w cezie, do chłodzenia wymagane są dwa lasery o częstotliwościach różniących się o 8,942 GHz: chłodzący, dostrojony do przejścia  $6^2S_{1/2}$ ,  $F=4 - 6^2P_{3/2}$ ,  $F'=5$  i repompujący, dostrojony do przejścia  $6^2S_{1/2}$ ,  $F=3 - 6^2P_{3/2}$ ,  $F'=4$ . Laser repompujący zbudowany w ramach pracy licencjackiej, będzie modyfikacją rozwiązania zademonstrowanego przez W. Diao et al., Opt. Express, 20(7), 748—7487 (2012). Idea tego układu jest następująca: wązka o mocy  $<1$  mW pochodząca z lasera chłodzącego zlokalizowanego do przejścia  $6^2S_{1/2}$ ,  $F=4 - 6^2P_{3/2}$ ,  $F'=5$  będzie wysłana do wnęki (repompującego) lasera diodowego pracującego jednomodowo tak, by

przekryła się przestrzennie z wiązką lasera repompującego, co doprowadzi do sprzężenia pomiędzy laserami. Prąd sterujący laserem diodowym będzie modulowany sygnałem o częstotliwości  $\sim 9$  GHz, dodanym przy użyciu Bias-Tee. Taka modulacja doprowadzi do wytworzenia wstęg bocznych pierwszego rzędu o mocy odpowiadającej kilku procentom całkowitej mocy lasera. Gdy wstęga boczna rzędu -1 zostanie zlokowana do lasera chłodzącego poprzez zasiewanie, częstotliwość nośna lasera repompującego będzie odpowiadała częstotliwości przejścia  $6^2S_{1/2}, F=3 - 6^2P_{3/2}, F'=4$ .

Proponowany projekt jest ściśle doświadczalny. Konieczność pracy ze źródłem mikrofal, zasilaczami prądowymi, miernikami mocy, diodami laserowymi i innymi elementami optycznymi pozwoli studentom na zapoznanie się z urządzeniami używanymi we współczesnych eksperymentach fizyki atomowej, molekularnej i optyki.

Zbudowany laser będzie wykorzystywany w laboratorium opiekuna przez wiele lat i stanie się istotnym elementem układu eksperymentalnego, który zostanie wykorzystany do wytworzenia kondensatu Bosego-Einsteina cezu i do dalszych badań ultrazimnej mieszaniny potasu i cezu.

## **15. Konstrukcja spektrometru diagnostycznego bardzo dużej rozdzielczości**

**Opiekun: dr hab. Wojciech Wasilewski**

Zadaniem studenta będzie złożenie i przetestowanie spektrometru do precyzyjnego pomiaru długości fali lasera. Temat pomyślany jest jako okazja do zapoznania z precyzyjnymi metodami optomechanicznymi i szybką analizą obrazu z kamery.

## **16. Interferencyjny pomiar kształtu chmury atomowej**

**Opiekun: dr hab. Wojciech Wasilewski**

Typowe pomiary stanu atomów powodują jego drastyczną zmianę. W ramach tej pracy użyjesz szybkiego modulatora elektrooptycznego aby wytworzyć taki stan światła, który posłuży do łatwego interferencyjnego pomiaru współczynnika załamania atomów i dzięki temu jedynie nieznacznie zaburza ich stan.

Zadaniem studenta będzie rejestracja i analiza obrazu interferencyjnego chmury atomów, który umożliwi określenie jej kształtu na podstawie pomiaru współczynnika załamania.

Zasadniczą częścią będzie konstrukcja odpowiedniego układu eksperymentalnego i oprogramowanie szybkiej kamery.

## ZAKŁAD BIOFIZYKI

### 1. „Struktura przestrzenna enzymu PNP z dyfrakcji promieniowania X na kryształach”

**opiekun: prof. dr hab. Maria Agnieszka Bzowska** [e-mail: abzowska@biogeo.uw.edu.pl](mailto:abzowska@biogeo.uw.edu.pl) [tel. 22 55 40 789](tel:225540789)

Opis: Dyfrakcja rentgenowska to jedna z dwóch metod eksperymentalnych umożliwiających poznanie struktury przestrzennej cząsteczek z rozdzielczością atomową, a jedyna, która nie ma ograniczeń na wielkość badanej cząsteczki. Ambitnej osobie zainteresowanej wykonaniem pracy licencjackiej w roku akademickim 2016/2017 proponujemy podjęcie próby uzyskania struktury przestrzennej heksamerycznej fosforylasy nukleozydów purynowych z *E. coli* z wolnym od ligandu miejscem wiązania substratów. Wszystkie do tej pory znane i zdeponowane z bazy Protein Data Bank struktury kompleksów tego białka z ligandami uzyskano z jonem siarczanowym lub fosforanowym, co uniemożliwia to badanie oddziaływań enzymu z ligandami w warunkach fizjologicznych. Białko do prób krystalizacyjnych zostanie przygotowane samodzielnie przez licencjanta na Politechnice Warszawskiej pod opieką dr hab. Joanny Cieśla. Następnie prowadzona będzie (na Wydziale Fizyki) optymalizacja warunków krystalizacji wstępnie określonych przez mgr Martę Narczyk. Jeśli uda się uzyskać odpowiednie kryształy, zostanie sprawdzona ich zdolność dyfrakcyjna przy pomocy dyfraktometru SuperNova (w Zakładzie Biofizyki) i w przypadku odpowiedniej zdolności rozdzielczej (minimum 2.8 Å) – zebrane pełne dane dyfrakcyjne. Praca ta może przerodzić się w pracę magisterską, polegającą na:

a) rozwiązaniu i ułożeniu struktury - jeżeli w wyniku optymalizacji warunków wstępnie określonych przez mgr Martę Narczyk uzyskany zostanie kryształ o zdolności rozdzielczej minimum 2.8 Å (wiarygodna rozdzielczość atomowa)

b) użyciu screenów krystalizacyjnych i powtórzeniu procedury krystalizacji, optymalizacji i zbierania danych - jeżeli w wyniku optymalizacji warunków wstępnie określonych przez mgr Martę Narczyk nie uda się uzyskać kryształu o zdolności rozdzielczej minimum 2.8 Å.

Fosforylasy nukleozydów purynowych (PNP) to kluczowe enzymy metabolizmu składników kwasów nukleinowych. Fosforylasy izolowane z różnych źródeł oraz silne selektywne inhibitory fosforylaz z tkanek ludzkich czy organizmów chorobotwórczych mają potencjalne ogromne znaczenie praktyczne, głównie w medycynie, np. jako leki immunosupresyjne czy przeciwpasożytnicze, a także – mniej specyficzne fosforylasy z niektórych bakterii, w tym przedmiot badań proponowanej pracy, PNP z *E. coli* - w chemii nukleozydów purynowych oraz w opracowywanej terapii genowej niektórych nowotworów.

#### Literatura:

[1] Mikleušević, G., Štefanić, Z., Narczyk, M., Wielgus-Kutrowska, B., *et al.*, Validation of the catalytic mechanism of *Escherichia coli* purine nucleoside phosphorylase by structural and kinetic studies. *Biochimie* 2011, 93, 1610-1622.

[2] Štefanić, Z., Mikleušević, G., Narczyk, M., Wielgus-Kutrowska, B., *et al.*, Still a Long Way to Fully Understanding the Molecular Mechanism of *Escherichia coli* Purine Nucleoside Phosphorylase. *Croatica Chemica Acta* 2013, 86, 117-127.

[3] Koellner, G., Bzowska, A., Wielgus-Kutrowska, B., Luić, M., *et al.*, Open and closed conformation of the *E. coli* purine nucleoside phosphorylase active center and implications for the catalytic mechanism. *Journal of Molecular Biology* 2002, 315, 351-371.

### 2. „Badania porównawcze stabilności termicznej białek *Decapping Scavenger* z różnych organizmów”

**opiekun: dr Zbigniew Darżynkiewicz CeNT I UW**, [e-mail: zibi@biogeo.uw.edu.pl](mailto:zibi@biogeo.uw.edu.pl) [tel. 55 40 780](tel:225540780)

**współopiekun: prof. dr hab. Jan Antosiewicz;** e-mail: [jantosi@biogeo.uw.edu.pl](mailto:jantosi@biogeo.uw.edu.pl) tel. 55 40 786

**Opis:** Białko Decapping Scavenger (DcpS) bierze udział w ostatnim etapie degradacji mRNA, hydrolizując dinukleotydy lub krótkie oligonukleotydy zakończone specyficzną strukturą kapu na 5' końcu. Zidentyfikowane dotychczas białka z różnych organizmów charakteryzują się wysokim podobieństwem sekwencyjnym, a także strukturalnym (na podstawie znanych struktur krystalograficznych białka ludzkiego i drożdżowego). Wykazują natomiast duże różnice w szybkości katalizy reakcji, a także w powinowactwie do ligandów. Celem niniejszej pracy jest wyznaczenie charakterystyki stabilności termicznej tych białek przy użyciu wybranej (wybranych) techniki biofizycznej: spektroskopii emisyjnej, spektroskopii dichroizmu kołowego lub kalorymetrii skaningowej. Poszczególne techniki pozwalają na obserwację: zmian fluorescencji wybranych, emitujących aminokwasów; zmianę otoczenia aminokwasów aromatycznych indukowaną rearanżacją struktury; efekty cieplne związane z rozwijaniem struktury drugo- i trzeciorzędowej białka. Badania przeprowadzone zostaną zarówno dla białek w formie *apo*-, jak i w kompleksie z ligandami. Uzyskane wyniki będą znaczące dla poznania biofizycznych mechanizmów funkcjonowania enzymów DcpS. Proponowane podejście eksperymentalne, dzięki badaniu białek w roztworze, pozwoli uzyskać informacje nieosiągalne za pomocą krystalografii rentgenowskiej.

### **3. „Przegląd teorii i modeli przyczynowości w badaniach dynamiki układów złożonych” opiekun: prof. dr hab. Bogdan Lesyng, e-mail: [lesyng@gmail.com](mailto:lesyng@gmail.com) tel. 22 55 40 809**

**Opis:** Badając układy złożone, do których należą m.in. układy biomolekularne, potrafimy często metodami zaawansowanych technik symulacyjnych opartych o prawa fizyki przewidzieć jak będzie wyglądała ewolucja tych układów w dalszej przyszłości. Chociaż potrafimy często przewidzieć przyszłość nie zawsze rozumiemy dlaczego procesy przebiegają tak jak je obserwujemy, szczególnie jeżeli prowadzą one do określonych, jakościowych przemian strukturalnych. W celu identyfikacji istotnych elementów modelu, które decydują o wyborze jednego z wielu możliwych scenariuszy ewolucyjnych, stosuje się metody analizy przyczynowości. W roku 2003 W. J. Granger oraz R. F. Engle otrzymali nagrodę Nobla za sformułowanie podstaw teorii analizy przyczynowości. Celem pracy dyplomowej będzie opracowanie przeglądu współczesnych teorii i modeli analizy przyczynowości złożonych układów, szczególnie układów (bio)molekularnych oraz w miarę możliwości wykonanie prostych demonstracyjnych symulacji obrazujących matematykę i fizykę badanego problem.

### **4. „Przegląd gruboziarnistych modeli dynamiki molekularnej”**

**opiekun: prof. dr hab. Bogdan Lesyng, e-mail: [lesyng@gmail.com](mailto:lesyng@gmail.com) tel. 22 55 40 809**

**Opis:** Metody dynamiki molekularnej stosuje się do symulacji ruchów atomów w (bio)molekułach wynikających z molekularnych sił. Niestety, jeżeli podstawowymi obiektami są atomy długość kroku całkowania równań ruchu musi być bardzo mała – mniejsza o rząd wielkości od okresu najszybszych oscylacji, które zachodzą w układzie - w praktyce rzędu  $10^{-14}$ s. Obejściem problemu jest uwzględnienie większych fragmentów molekularnych, np. reszt aminokwasowych, jako podstawowych elementów strukturalnych co pozwala wydłużyć długość kroku o dwa rzędy wielkości. W tym przybliżeniu trzeba jednak umieć generować efektywne siły działające na te fragmenty. Problem jest na tyle ważny i interesujący, że stanowi przedmiot badań wielu grup badawczych. Celem pracy jest dokonanie przeglądu najnowszych publikacji dotyczących tej tematyki oraz w miarę możliwości wykonanie prostych demonstracyjnych symulacji obrazujących fizykę badanego problem.

### **5. „Przegląd modeli Monte-Carlo stosowanych w metodach molekularnego modelowania”**

**opiekun: prof. dr hab. Bogdan Lesyng**, e-mail: [lesyng@gmail.com](mailto:lesyng@gmail.com) tel. 22 55 40 809

**Opis:** Metody Monte-Carlo (MC) stosowane są

. Ostatnio w literaturze

pojawiło się wiele

, np. tzw. metody

wymiany replik (*replica exchange method*). Celem pracy jest wykonanie przeglądu literaturowego najbardziej efektywnych metod Monte-Carlo stosowanych w badaniach złożonych układów (bio)molekularnych oraz w miarę możliwości wykonanie prostych demonstracyjnych symulacji obrazujących fizykę badanego problemu.

#### **6. „Porównanie właściwości substratowych i parametrów kinetycznych wybranych ssaczych enzymów z rodziny Nudix.”**

**opiekun: dr Maciej Łukaszewicz**, e-mail: [mlukas@biogeo.uw.edu.pl](mailto:mlukas@biogeo.uw.edu.pl) tel. 55 40 781

**Opis:** Usunięcie struktury kapu (m7GpppN) jest jednym z kluczowych etapów regulujących stabilność mRNA w komórce. Jednym z enzymów hydrolizujących strukturę kapu jest Dcp2 – fosfohydrolaza z rodziny Nudix (Nucleoside Diphosphate linked to X). Dcp2 hydrolizuje kap przyłączony do długich łańcuchów mRNA zawierających powyżej 25 nukleotydów (odcina m7Gpp) i tym samym inicjuje degradację w kierunku 5'→3'. Ostatnio opisano nowe enzymy z rodziny Nudix zaangażowane w hydrolizę struktury kapu i kontrolę jakości kapowania mRNA (np. hNudt16, hNudt12, hNudt15 czy Dxo1), co sugeruje że regulacja procesu degradacji mRNA (a tym samym stabilność mRNA) odbywa się na wielu ścieżkach, które mogą być specyficzne w zależności od typu transkryptu RNA czy typu komórki. Dokładna wiedza na temat regulacji degradacji mRNA w komórkach staje się dziś niezwykle ważna ze względu na coraz szersze wykorzystanie mRNA jako cząsteczki terapeutycznej. Praca będzie związana z oczyszczaniem wybranych dwóch ssaczych enzymów z rodziny Nudix, charakterystyki ich specyficzności substratowej (przy wykorzystaniu HPLC i/lub rozdziału elektroforetycznego w żelach denaturujących) oraz wyznaczeniem i porównaniem ich podstawowych parametrów kinetycznych.

#### **7. „Modyfikowane analogi struktury kapu 5'-końca mRNA jako potencjalne inhibitory kap-zależnej translacji - badania w układach translacji *in vitro*”**

**opiekun: dr Maciej Łukaszewicz**, e-mail: [mlukas@biogeo.uw.edu.pl](mailto:mlukas@biogeo.uw.edu.pl) tel. 55 40 781

**Opis:** Modyfikowane analogi struktury kapu 5'-końca mRNA są badane pod kątem zastosowań terapeutycznych: jako inhibitory białka eIF4E nadprodukowanego w niektórych typach nowotworów, i jako element struktury mRNA terapeutycznego poprawiający jego stabilność w warunkach komórkowych i właściwości translacyjne (np. Piecyk, Łukaszewicz, Darzynkiewicz, Jankowska-Anyska: „*Triazole-containing monophosphate mRNA cap analogs as effective translation inhibitors*.” RNA 2014). Praca będzie dotyczyła charakterystyki nowych serii modyfikowanych analogów kapu m.in.:

- a) analizy ich właściwości inhibitorowych w układzie (układach) translacji *in vitro* i wyznaczenie wartości IC50,
- b) analizy oporności na enzymy dekapujące (DcpS, Nudt), w celu wytypowania związków do testów *in vivo*.

#### **8. „Badania oddziaływań wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych z kluczowym białkiem regulującym ekspresję genów na poziomie inicjacji translacji, eIF4E”**

**opiekun: dr Anna Niedźwiecka** Instytut Fizyki PAN, e-mail: [annan@ifpan.edu.pl](mailto:annan@ifpan.edu.pl) tel. 55 40 789

**współopiekun: prof. dr hab. Edward Darzynkiewicz**, e-mail: [edek@biogeo.uw.edu.pl](mailto:edek@biogeo.uw.edu.pl) tel. 55 40 787.

Opis: Pierścieniowe węglowodory aromatyczne oddziałują na zdrowie człowieka na różne sposoby. Bywają toksyczne lub stanowią podstawę skutecznych leków, w zależności od szczegółów swojej budowy. Z drugiej strony, własności fluorescencyjne związków wielopierścieniowych są wykorzystywane jako sondy molekularne. W literaturze można znaleźć wiele opracowań dotyczących oddziaływań z białkami modelowymi takimi jak np. albumina, brak jest natomiast badań poświęconych możliwości tworzenia kompleksów z białkami odgrywającymi kluczową rolę w ekspresji genów, które rozpoznają i tworzą kompleksy z biologicznie istotnymi aromatycznymi związkami heterocyklicznymi. W proponowanej pracy przebadane zostaną oddziaływania pochodnych perylenu i innych związków aromatycznych z kluczowym białkiem regulującym ekspresję genów na poziomie inicjacji translacji, eIF4E (*eukaryotic initiation factor 4E*), metodami spektroskopii molekularnej.

### **9. „Zastosowanie spektroskopii dichroizmu kołowego w badaniach oddziaływania czynnika inicjacji translacji eIF4E z inhibitorowym białkiem 4E-BP1 oraz analogami kapu”**

**opiekun: dr Anna Modrak-Wójcik**, e-mail: [ankam@biogeo.uw.edu.pl](mailto:ankam@biogeo.uw.edu.pl) tel. 55 40 779

Inicjacja translacji w komórkach eukariotycznych jest złożonym procesem tworzenia kompleksów wielu białek oraz RNA i determinuje wypadkową szybkość biosyntezy białek. Szczególną rolę odgrywa białkowy czynnik translacyjny eIF4E, który inicjuje translację przyłączając się do charakterystycznej struktury kapu na 5'-końcu mRNA. Podwyższone stężenie eIF4E występuje w wielu rodzajach komórek nowotworowych. Białko 4E-BP1 (4E binding protein), poprzez utworzenie kompleksu z eIF4E i uniemożliwienie przyłączania się kolejnych czynników translacyjnych, prowadzi do zahamowania procesu translacji. Znajomość molekularnego mechanizmu oddziaływania białek eIF4E i 4E-BP1 może okazać się istotna z medycznego punktu widzenia. Dotychczasowe badania wykazały, że miejsca wiązania kapu i 4EBP1 w eIF4E, choć przestrzennie odległe, nie są niezależne. Wyniki te sugerują zachodzenie reorganizacji strukturalnej w miejscu wiązania 4E-BP1 na skutek związania kapu i *vice versa* – w miejscu wiążącym kap po przyłączeniu 4E-BP1. Praca będzie dotyczyła obserwacji tworzenia kompleksów podwójnych 4E-BP1/eIF4E i eIF4E/kap oraz potrójnych 4E-BP1/eIF4E/kap z wykorzystaniem spektroskopii dichroizmu kołowego w dalekim i bliskim ultrafiolecie (*far-UV i near-UV CD*).

## **ZAKŁAD FIZYKI JĄDROWEJ**

### **"Badanie mechanizmów powstawania deformacji w jądrach atomowych"**

**Opiekun: prof. dr hab. Waldemar Urban**

Jadro atomowe, które ma rozmiary o cztery rzędy wielkości mniejsze od klasycznego układu kwantowego jakim jest atom, jest obiektem ekstremalnie kwantowym. Według wczesnych wyobrażeń, jadro powinno mieć kształt sferyczny, bo taką symetrię mają oddziaływania jądrowe. Jednak jak pokazano doświadczalnie, większość znanych jąder jest zdeformowana i zaczyna przeważać pogląd, że deformacja jest stanem naturalnym dla jąder, a kształt sferyczny czymś egzotycznym. Powodem deformacji są silne efekty kwantowe obecne we wszystkich jądrach. Tylko w niewielu przypadkach, gdy liczby protonów lub neutronów osiągają tzw. wartości magiczne, efekty te uśredniają się pozwalając jądru przyjąć kształt sferyczny. Szczególnie ciekawe są sytuacje, gdy jądra sferyczne sąsiadują z jądrami silnie zdeformowanymi. Z jednej strony tacy sąsiedzi są podobni, ze względu na podobny skład

nukleonowy, a z drugiej strony bardzo się różnią kształtem. Pojawia się wtedy także możliwość, że jądro może przybierać oba kształty. Badanie takich jąder jest szczególnie cenne dla poznania mechanizmów kwantowych tworzących deformacje. Izotop  $^{98}\text{Sr}$  jest jądrem z takiego pogranicza.

Proponowany temat obejmuje potwierdzenie kształtu sferycznego w jądrze  $^{98}\text{Sr}$ , w którym zaobserwowano wcześniej kształt zdeformowany. Jest to praca doświadczalna, polegająca na analizie już zmierzonych danych, z ciekawym programem interpretacyjnym, który jednak nie wykracza poza podstawowe zagadnienia mechaniki kwantowej jak np. mieszanie dwóch stanów kwantowych. Wyniki analizy będą opublikowane w międzynarodowym czasopiśmie. Istnieje możliwość dalszego rozwijania tego tematu w pracy magisterskiej.

### **"Badanie egzotycznych jąder atomowych o dużym nadmiarze neutronów"**

**Opiekun: dr hab. Jan Kurpeta**

Proponowany temat dotyczy bardzo egzotycznych (nie występujących naturalnie w warunkach ziemskich) nuklidów, których poznanie dostarcza nowych informacji o budowie materii jądrowej. Ponadto badane jądra leżą w pobliżu ścieżki procesu  $r$ , który jest odpowiedzialny za występowanie we Wszechświecie około połowy pierwiastków cięższych od żelaza. Uzyskane wyniki mają znaczenie dla poszerzania wiedzy z zakresu fizyki jądrowej oraz astrofizyki.

Wykonanie pracy będzie polegało na analizie danych zawierających informacje o koincydencjach promieniowania gamma i cząstek beta wysyłanych przez radioaktywne jądra atomowe. Dane do analizy pochodzą z unikalnego układu doświadczalnego, który jest połączeniem magnetycznego separatora masowego z pułapką jonową typu Penning'a. Niezwykle wysoka masowa zdolność rozdzielcza pułapki jonowej pozwala obserwować bardzo czyste widma promieniowania emitowanego przez badane izotopy.

Osoby zainteresowane metodami eksperymentalnymi mogą w ramach pracy licencjackiej zapoznać się z nowoczesnym, cyfrowym systemem zbierania danych. Możliwe jest kontynuowanie zaproponowanej tematyki w ramach współpracy z wybranymi laboratoriami europejskimi. Ostateczny temat, zakres i sposób wykonania pracy ustalane są w rozmowie z opiekunem, proszę o kontakt na adres [jkurpeta@mimuw.edu.pl](mailto:jkurpeta@mimuw.edu.pl).

### **"Naturalne i sztuczne źródła promieniowania gamma w otoczeniu człowieka."**

**Opiekun: dr hab. Jan Kurpeta**

Promieniowanie jonizujące występuje powszechnie w naszym otoczeniu. Największy wkład do natężenia naturalnego promieniowania gamma pochodzi z rozpadu promieniotwórczych izotopów występujących w skorupie ziemskiej. W szczególnych przypadkach można także wykryć promieniowanie gamma spowodowane działalnością człowieka. Pomiary metodami spektroskopii fotonów gamma pozwalają zaobserwować i zidentyfikować promieniotwórcze izotopy występujące w środowisku człowieka. Dzięki istniejącemu w naszym Zakładzie stanowisku do pomiarów niskotłowych, możliwe jest precyzyjne określenie parametrów promieniowania gamma emitowanego przez wybrane próbki materiałów występujących w naszym otoczeniu. W ramach proponowanego tematu można dokonać analizy danych oraz wykonać pomiary energii i natężenia fotonów gamma emitowanych przez wybrane próbki. Ostateczny temat, zakres i sposób wykonania pracy ustalane są w rozmowie z opiekunem, proszę o kontakt na adres [jkurpeta@mimuw.edu.pl](mailto:jkurpeta@mimuw.edu.pl).

## **Badanie własności stanów wzbudzonych $^{86}\text{Rb}$ populowanych w reakcji $(n,\gamma)$**

**Opiekun: dr Agnieszka Korgul**

Celem pracy jest uzyskanie informacji o energiach oraz spinach stanów wzbudzonych  $^{86}\text{Rb}$ , populowanych w wyniku wychwytu neutronów przez jądra  $^{85}\text{Rb}$ . Realizacja tego celu będzie wymagała przeprowadzenia analizy danych z eksperymentu wykonanego w laboratorium ILL Grenoble i ustalenia relacji koincydencyjnych oraz korelacji kątowych kwantów gamma emitowanych ze stanów wzbudzonych  $^{86}\text{Rb}$ .

## **Neutronowa analiza aktywacyjna**

**Opiekun: dr Krzysztof Miernik**

Neutronowa analiza aktywacyjna to metoda badania materiałów polegająca na naświetleniu próbki wiązką neutronów. Na drodze reakcji wychwytu neutronu część ze stabilnych nuklidów przemienia się w jądra ulegające przemianom beta minus. Podczas tej przemiany emitowane jest charakterystyczne promieniowanie gamma, które możemy rejestrować i na podstawie jego intensywności oceniać zawartość danego pierwiastka w badanej próbce. Oczywiście nie każdy pierwiastek nadaje się do detekcji tą metodą, ale jej dużą zaletą jest możliwość czułego i niedestrukcyjnego badania przedmiotów i dlatego jest stosowana w różnych gałęziach nauki i życia takich jak geologia, archeologia czy kryminalistyka. Praca licencjacka ma na celu zaplanowanie eksperymentu, przygotowanie detektorów i zbadanie wybranych przez studenta próbek substancji lub materiałów.

## **Rutherfordowskie rozpraszanie ciężkich jonów**

**Prowadzący: prof. K. Rusek (ŚLCJ), dr I. Skwira-Chalot**

Temat doświadczalny polegający na wykonaniu pomiarów przy użyciu wiązki jonów cyklotronu U200P w Środowiskowym Laboratorium Ciężkich Jonów. Celem pracy jest wykonanie pomiarów rozkładów kątowych elastycznego rozpraszania jonów  $^{12}\text{C}$ ,  $^{14}\text{N}$ ,  $^{16}\text{O}$ ,  $^{22}\text{Ne}$  na tarczy  $^{197}\text{Au}$  w celu przygotowania aparatury (komory rozproszeń i detektorów) do wykonania oryginalnych pomiarów reakcji jądrowych.

Praca obejmuje:

- a) zaprojektowanie geometrii układu eksperymentalnego w oparciu o oszacowania teoretyczne
- b) sprawdzenie i kalibrację detektorów przy użyciu źródeł
- c) montaż aparatury
- d) wykonanie pomiarów z wiązką
- e) interpretację – porównanie rozkładów kątowych ze wzorem Rutherforda
- f) określenie kąta granicznego stosowalności wzoru Rutherforda.

Praca pozwoli zapoznać się z aparaturą i metodami pomiarów z wykorzystaniem akceleratorów w nauce i technice. W szczególności prowadzeniem i diagnostyką wiązki jonów, uzyskiwaniem próżni, nowoczesnymi detektorami półprzewodnikowymi, analizą widm produktów rozpraszania.

## **ZAKŁAD FIZYKI CIAŁA STAŁEGO**

### **Rentgenowskie badania interkalowanych wielowarstw grafenowych.**

**Opiekun: dr hab. Grzegorz Kowalski**, tel. (22) 55 32 789, kowal@fuw.edu.pl **lub dr Mateusz Tokarczyk** tel. (22) 55 32 790, mateusz.tokarczyk@fuw.edu.pl

Grafen to pojedyncza warstwa atomowa węgla. Technologicznie uzyskuje się od 1 do kilkunastu warstw nałożonych na siebie. Ich własności silnie zależą od odległości międzypłaszczyznowych i obecności między warstwami innych atomów lub cząsteczek. Instytut Technologii Materiałów Elektronicznych we współpracy z Wydziałem Fizyki UW pracuje nad nowymi układami grafenu na podłożach z węgla krzemu. Materiał ten kryje w sobie wiele zagadek i stanowi bardzo interesujący obiekt badań. Interkalacją to kontrolowane umieszczanie innych atomów lub cząsteczek w obszarach międzypłaszczyznowych w procesach wzrostu lub po jego zakończeniu.

W ramach pracy licencjackiej będzie możliwość wykorzystania różnych metod rentgenowskich do badania interkalowanych warstw grafenowych. Badania z wykorzystaniem rentgenowskiego dyfraktometru i ew. modelowania komputerowego wyników eksperymentalnych.

### **Wysokorozdzielcze rentgenowskie badania warstw otrzymywanych metodą MBE lub metodą MOVPE**

**Opiekun: dr hab. Grzegorz Kowalski**, tel. (22) 55 32 789, kowal@fuw.edu.pl **lub dr Mateusz Tokarczyk** tel. (22) 55 32 790, mateusz.tokarczyk@fuw.edu.pl

Rentgenowskie badania dyfrakcyjne pozwalają m.in. na określenia jakości krystalicznej badanego materiału. Dzięki pomiarom wysokorozdzielczym można uzyskać informacje m.in. o składzie, naprężeniach i grubości warstw epitaksjalnych. Wykonanie na dyfraktometrze rentgenowskim wysokorozdzielczych pomiarów dyfrakcyjnych warstw otrzymanych metodą MBE lub MOVPE pozwala na wyznaczenie podstawowych parametrów sieciowych badanych struktur. Własności strukturalne wielowarstw otrzymywanych metodami MBE lub MOVPE silnie wpływają np. na ich

parametry optyczne, magnetyczne. Kropki i studnie kwantowe otrzymywane w w/w procesach są zwykle częścią struktur wielowarstwowych. W ramach pracy licencjackiej będzie możliwość wykorzystania różnych metod rentgenowskich i ew. modelowania komputerowego wyników eksperymentalnych.

### **"Czasowo- i przestrzennie- rozdzielcze pomiary struktur azotkowych"**

**Opiekun: dr hab. Krzysztof Korona:**

Problem transportu nierównowagowych nośników ładunków elektrycznych w półprzewodnikach jest kluczowy dla wielu zastosowań. W azotkach czas życia nośników jest stosunkowo krótki, często poniżej 1 ns. Aczkolwiek dzięki wbudowaniu pola elektrycznego lub wytworzeniu struktur sprzężonych rozdzielających elektrony i dziury można czasy życia wydłużyć do zakresu mikrosekund. Planujemy przy pomocy pomiarów optycznych prześledzić zmiany rozkładu nośników w funkcji czasu w strukturach azotkowych otrzymanych dzięki współpracy z IWC PAN (Unipress).

### **Tranzystory Si-MOSFET zintegrowane z antenami planarnymi jako detektory promieniowania THz.**

**Opiekun: dr hab. Jerzy Łusakowski, prof. nzw. UW**

Celem pracy jest wykonanie i zinterpretowanie pomiarów odpowiedzi tranzystorów polowych Si-MOSFET na promieniowanie elektromagnetyczne w zakresie 110 - 160 GHz. Pomiary przeprowadzane będą w temperaturze pokojowej. Badane tranzystory wyposażone są w

anten planarne szerokopasmowe i rezonansowe. Wyniki będą interpretowane w oparciu o model wzbudzeń plazmonowych w tranzystorach polowych, z uwzględnieniem parametrów układu odczytowego.

#### **Fotoluminescencja podwójnych studni kwantowych CdTe/CdMgTe.**

**Opiekun: dr hab. Jerzy Łusakowski, prof. nzw. UW**

badane będą podwójne studnie kwantowe CdTe/CdMgTe domieszkowane w taki sposób, aby każda z nich zawierała gaz elektronowy o dużej ruchliwości. Pomiary będą prowadzone w temperaturze pompowanego helu (ok. 1.6 K) i polu magnetycznym do 7 T. Celem pomiarów jest określenie, czy za pomocą pomiarów fotoluminescencji można scharakteryzować oddziaływanie między gazem dwuwymiarowym w sąsiednich studniach kwantowych.

#### **Fotoluminescencja heterostruktur GaAs/AlGaAs zawierających dwuwymiarową plazmę elektronową.**

**Opiekun: dr hab. Jerzy Łusakowski, prof. nzw. UW**

Badania obejmą heterostruktury GaAs/AlGaAs zawierające gaz elektronowy o ekstremalnie wysokiej ruchliwości. Pomiary będą prowadzone w temperaturze pompowanego helu (ok. 1.6 K) i polu magnetycznym do 7 T. Celem badań jest obserwacja kwantyzacji Landaua w badanej heterostrukturze oraz wpływu domieszkowania na zależność położenia poziomów Landaua od pola magnetycznego.

#### **Magnetospektroskopia THz dwuwymiarowej plazmy w heterostrukturze GaAs/AlGaAs.**

**Opiekun: dr hab. Jerzy Łusakowski, prof. nzw. UW**

Badania dotyczą reakcji dwuwymiarowej plazmy elektronowej w heterostrukturze GaAs/AlGaAs na promieniowanie dalekiej podczerwieni (THz). Pomiary będą prowadzone w temperaturze pompowanego helu (ok. 1.6 K) i polu magnetycznym do 12 T, przy użyciu źródeł monochromatycznych promieniowania THz. Badany będzie fotoprąd lub fotonapięcie generowane pod wpływem promieniowania THz. Celem badań jest określenie dyspersji plazmonów w heterostrukturze GaAs/AlGaAs.

#### **Badanie mechanizmów rozpraszania w grafenie funkcjonalizowanym.**

**Opiekun: dr hab. Aneta Drabińska**

Tematem badań będą własności rozpraszeniowe grafenu funkcjonalizowanego roztworami soli. Metody badawcze obejmować będą bezkontaktowe pomiary przewodnictwa w spektroskopii mikrofalowej oraz badania efektu Ramana. Celem pracy będzie zbadanie wpływu funkcjonalizacji na rozpraszania elektronów między oraz wewnątrz stożków Diraca.

#### **„Badania fotomagnetyczne ciekłokrystalicznych rodników”)**

**Opiekun: dr hab. Jacek Szczytko**

Pomiar własności magnetycznych ciekłokrystalicznych rodników na magnetometrze SQUID. Materiały będące przedmiotem badań są oparte o stabilny rodnik werdazyłowy i charakteryzują się dużą różnorodnością strukturalną i supramolekularną (tworzą różne fazy ciekłokrystaliczne). Własności magnetyczne tych materiałów zmieniają się z podświetleniem. Zadaniem badawczym będą pomiary w magnetometrze SQUID w funkcji temperatury, pola magnetycznego oraz mocy pobudzającego próbki światła.

#### **„Modelowanie metodą Monte Carlo własności magnetycznych nanocząstek Co”**

**Opiekunowie: Jacek Szczytko, Andrzej Majhofer**

Praca związana z modelowaniem metodą Monte Carlo układu nanocząstek ferromagnetycznego kobaltu i wyznaczeniem parametrów anizotropii, które opisują wyniki doświadczalne.

**„Modelowanie mikrownęki dla silnego sprzężenia nanocząstek up-konwerujących ze światłem” Opiekunowie: Jacek Szczytko, Barbara Piętka**

(praca licencjacka, obliczenia numeryczne)

Praca związana z projektowaniem mikrownęki złożonej z luster dielektrycznych do badań up-konwersji nanocząstek zawierających jony ziem rzadkich. Wyniki obliczeń (preferowane programy obliczeniowe to Mathematica lub Matlab) zostaną przetestowane na rzeczywistych strukturach otrzymanych w Zakładzie Fizyki Ciała Stałego. Nanocząstki up-konwertujące mogą być stosowane w terapii medycznej do niszczenia nowotworów. Pobudzane światłem podczerwonym, przechodzącym przez ciało ludzkie, mogą emitować promieniowanie widzialne wykorzystywane w fototerapii.

**Struktury fotoniczne dla solotroniki**

**Opiekun: dr Wojciech Pacuski**

Solotronika to optoelektronika oparta na pojedynczych domieszkach.

Tematem pracy jest wytworzenie struktur fotonicznych z kropkami kwantowymi i zastosowanie ich do badania pojedynczych jonów magnetycznych oraz do manipulacji pojedynczym spinem. Praca składa się z części technologicznej w laboratorium epitaksji z wiązek molekularnych i z części optycznej w laboratorium ultra-szybkiej magnetospektroskopii.

**Własności magnetotransportowe kryształu PbSnSe poddanego napromienianiu wiązką elektronów.**

**Opiekunowie: dr Adam Kwiatkowski, e-mail: [Adam.Kwiatkowski@fuw.edu.pl](mailto:Adam.Kwiatkowski@fuw.edu.pl), prof. dr hab. Dariusz Wasik, e-mail: [daw@fuw.edu.pl](mailto:daw@fuw.edu.pl)**

Proponowana praca licencjacka wiąże zagadnienia fizyki półprzewodników z elementami fizyki jądrowej tj. badania izolatorów topologicznych napromieniowanych wiązką elektronów o energii 2.5 MeV. Tematyka izolatorów topologicznych jest aktualnie tzw. gorącym tematem fizyki ciała stałego. Będące przedmiotem badań kryształy PbSnSe należy do nowej klasy materiałów nazywanych topologicznymi izolatorami krystalicznymi. Są to materiały, które w objętości mogą być dobrymi izolatorami elektrycznymi, natomiast na ich powierzchni w pewnych warunkach tworzą się powierzchniowe stany metaliczne. W ramach pracy licencjackiej należy wykonać pomiary oporu podłużnego i oporu poprzecznego w niskiej temperaturze (ciekłego helu) w funkcji pola magnetycznego próbek napromieniowanych elektronami. Badania te będą prowadzone we współpracy z Instytutem Fizyki PAN oraz Ecole Polytechnique w Palaiseau we Francji.

**Wpływ otoczenia atmosferycznego na własności fizyczne warstw grafenowych.**

**Opiekun: dr Marta Borysiewicz, [Marta.Borysiewicz@fuw.edu.pl](mailto:Marta.Borysiewicz@fuw.edu.pl)**

Od pewnego czasu w Zakładzie Fizyki Ciała Stałego prowadzone są badania grafenu, otrzymywanego epitaksjalnie na węglu krzemu (SiC). Właściwości tego materiału można w szerokim zakresie zmieniać już podczas wzrostu: od struktury z liniową, dirakowską zależnością dyspersyjną (monowarstwa) do struktur z zależnością paraboliczną (dwuwarstwa), od typu n do p, od materiału jedno- do wielonośnikowego. Dysponując szerokim spektrum próbek, chcemy ustalić, jak zewnętrzne czynniki, takie jak wilgotność, rodzaj gazu, wpływają na ich własności, czy zmiany są odwracalne, czy nie. Jest

to szczególnie ważne w kontekście zastosowań grafenu do czujników, zarówno gazowych, jak i np. pola magnetycznego, gdzie stabilność parametrów próbki jest kluczowa.

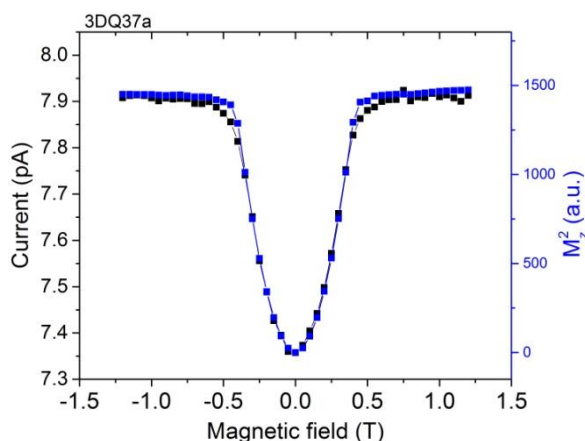
W ramach pracy licencjackiej wykonane zostaną systematyczne badania polegające na ciągłym monitorowaniu in situ jednocześnie przewodnictwa i koncentracji halowskiej próbek w funkcji dokonywanych w kontrolowany sposób zmian składu atmosfery, w której przetrzymywane będą próbki. Pomiary wykonywane będą z zastosowaniem przemennego pola magnetycznego i przemennego prądu próbki za pomocą woltomierzy typu lock-in pracujących w modzie „tandem demodulation” Zdobyta wiedza pozwoli wnioskować na temat mikroskopowych procesów oddziaływania atomów gazu z powierzchnią grafenu (np. ustalenie, czy mamy do czynienia z adhezją, czy interkalacją).

### **Badania wpływu napięcia na anizotropię magnetyczną GaMnAs wbudowanego w diodę Esakiego.**

**Opiekun:** dr Marta Borysiewicz, [Marta.Borysiewicz@fuw.edu.pl](mailto:Marta.Borysiewicz@fuw.edu.pl)

Arsenek galu z manganem jest modelowym półprzewodnikiem dla spintroniki. Atomy Mn wbudowane w sieć GaAs dostarczają nie tylko swobodnych nośników, ale są również źródłem momentów magnetycznych. Dla zawartości Mn powyżej ~1% materiał ten w odpowiednich warunkach staje się ferromagnetykiem – wykazuje uporządkowanie magnetyczne dalekiego zasięgu. Uporządkowaniu ulegają zarówno jony magnetyczne (Mn), jak i spiny swobodnych nośników. Stąd GaMnAs może stanowić dobre źródło spinowo spolaryzowanych elektronów(dziur), co potrzebne jest w urządzeniach spintronicznych. Taki proces wstrzykiwania spinów do półprzewodnika można efektywnie zrealizować w złączach

Przedmiotem badań są diody Esakiego GaMnAs/GaAs. Namagnesowanie w GaMnAs leży w płaszczyźnie warstwy. Przyłożenie pola magnetycznego w kierunku prostopadłym pozwala na obrót namagnesowania. Badając zależność prądu płynącego przez złącze od pola magnetycznego (tzw. magnetoprąd) przy ustalonej polaryzacji diody, obserwuje się krzywą przedstawioną na rys. 1. Zależność ta jest taka jak dla kwadratu prostopadłej składowej namagnesowania, zatem pozwala śledzić pozapłaszczyznową anizotropię magnetyczną. Planowane jest zbadanie ewolucji magnetoprądu od napięcia i stwierdzenie jak anizotropia zależy od napięcia polaryzacji.



Rysunek 1 Zależność prądu (oś lewa) i prostopadłej składowej namagnesowania (oś prawa) od pola magnetycznego.

### **Oddziaływanie między ekscytonami dwoma mikrownękami optycznymi**

**Opiekun:** dr Jan Suffczyński

W ramach pracy badane będą próbki półprzewodnikowe zawierające sprzężone mikrownęki optyczne. W każdej z mikrownęk umieszczona jest studnia kwantowa. Celem pracy jest obserwacja efektów oddziaływania między ekscytonami związanymi w studniach. Oddziaływanie to będzie mediowane poprzez mod optyczny zdelokalizowany między sprzężonymi wnękami. Badane próbki, wykonane z materiałów II-VI pochodzą z laboratorium MBE w Warszawie

## **Optycznie wykrywany rezonans magnetyczny na domieszkowanych heterostrukturach półprzewodnikowych**

**Opiekun: dr Mateusz Goryca**, tel. (22) 55 32 711, mgoryca@fuw.edu.pl

Optycznie wykrywany rezonans magnetyczny (ang. optically detected magnetic resonance - ODMR) to technika pomiarowa pozwalająca wykrywać znacznie mniejsze ilości atomów magnetycznych w próbce niż w przypadku typowego pomiaru elektronowego rezonansu paramagnetycznego (EPR). Dzięki temu stanowi doskonałe narzędzie do badania półprzewodnikowych nanostruktur domieszkowanych jonami magnetycznymi. Struktury takie z reguły zawierają o wiele rzędów wielkości mniej domieszek magnetycznych, niż materiały objętościowe. Jednocześnie jony te stanowią doskonałą sondę lokalnych własności (np. rozkładu lokalnych naprężeń) kryształu półprzewodnika, w który są wbudowane. Badania w ramach pracy licencjackiej pozwolą na zapoznanie się z tą ciekawą techniką (jak również z innymi, jak wysokie pola magnetyczne czy niskie temperatury) i wyznaczenie własności nanostruktur (studni, drutów lub kropek kwantowych), których wyznaczenie jest praktycznie niemożliwe przy użyciu innych technik.

## **„Sterowanie stanem ładunkowym kropek kwantowych umieszczonych w strukturze diody Schottkiego”**

**Opiekunowie: prof. dr hab. Piotr Kossacki i mgr Aleksander Bogucki**

Praca będzie związana z wytworzeniem struktur z diodami Schottkiego zawierającymi kropki kwantowe CdTe/ZnTe, w tym kropki z pojedynczymi jonami magnetycznymi. Otrzymane struktury będą badane metodami magnetospektroskopowymi i umożliwią sterowanie stanem ładunkowym pojedynczych kropek kwantowych.

## **„Badanie fotoluminescencji kropek kwantowych pobudzanych rezonansowo w kierunku płaszczyzny próbek”**

**Opiekunowie: prof. dr hab. Piotr Kossacki i dr Tomasz Kazimierczuk albo dr Mateusz Goryca**

Praca będzie związana z badaniem fotoluminescencji pojedynczych kropek kwantowych CdTe/ZnTe pobudzanych w nowej konfiguracji, w której kierunek biegu wiązki światła pobudzającego leży w płaszczyźnie próbki i jest prostopadły do kierunku detekcji luminescencji. Pomiaru będą prowadzone w polu magnetycznym.

## **Temat: Badania monowarstw dichalkogenków metali przejściowych metodą pompa-sonda**

**Opiekun: dr. Tomasz Kazimierczuk**

Monowarstwy dichalkogenków metali przejściowych są obecnie intensywnie badane ze względu na ich doskonałe własności optyczne. Siły oscylatora w tych materiałach są tak duże, że stała zaniku luminescencji ekscytonów jest w zakresie pojedynczych pikosekund. Badania dynamiki tych procesów wymagają zatem wykorzystania laserów femtosekundowych, np. w eksperymentach typu pompa-sonda.

## **„Badania optyczne struktur kwantowych wbudowanych w nanodrutu GaN”**

**Opiekun:**

Dr hab. Andrzej Wysmołek, prof. UW,

Zakład Fizyki Ciała Stałego

Struktury kwantowe (studnie kwantowe, kropki kwantowe) wbudowane w nanodrut GaN dają duże nadzieje na wykorzystanie w jako nanoźródła w obszarze ultrafioletu, w tym również źródła pojedynczych fotonów na potrzeby kryptografii kwantowej. Takie złożone nanostruktury są również bardzo obiecujące z punktu widzenia nanosensorów czy też ogniw słonecznych.

Nanodrut z wbudowanymi studniami, czy też kropkami kwantowymi są też bardzo interesujące z punktu widzenia zrozumienia procesów rekombinacji promienistej w nich zachodzących. W ramach pracy licencjackiej proponowane są badania z wykorzystaniem spektroskopii ramanowskiej oraz mikroluminescencji na grupach oraz pojedynczych nanodrutach GaN, również w silnych polach magnetycznych.

### **„Badania struktur hybrydowych grafen/TaS<sub>2</sub>”**

Opiekunowie:

Dr hab. Andrzej Wysmołek, prof. UW, prof. dr hab. Roman Stępniewski

Zakład Fizyki Ciała Stałego

Kryształy 2D, w tym dichalkogenki metali przejściowych (TMDC) skupiają na sobie bardzo intensywne zainteresowanie naukowców z całego świata. Spowodowane to jest wyjątkowymi właściwościami pojedynczych warstw tych materiałów, ale również możliwości budowania złożonych struktur kwantowych z nakładanych na siebie kolejnych warstw tych materiałów.

W ramach pracy licencjackiej proponowane są badania dwusiarczku tanalu (TaS<sub>2</sub>) oraz jego oddziaływania z grafenem.

TaS<sub>2</sub> wykazuje przejścia fazowymi pierwszego rodzaju związane z falami gęstości ładunku (CDW), wyraźnym przejściem izolator-metal oraz relatywnie wysoką wartością sprzężenia spin-orbita. Połączenie grafenu z TMDC daje unikalną możliwość stworzenia układu, który umożliwia generację i manipulowanie spinowo rozróżnialnymi nośnikami ładunku. Osobno TaS<sub>2</sub> oraz grafen nie są w stanie spełnić wymagań stawianych urządzeniom spintronicznym, natomiast w połączeniu są realnym kandydatem do budowy materiału hybrydowego, który może stać się podstawą systemów komputerowych nowej generacji. Żeby zrealizować te idee, należy najpierw w sposób wyczerpujący rozpoznać zjawiska, które występują na złączu grafen oraz TaS<sub>2</sub>.

W ramach pracy licencjackiej proponowane są badania ramanowskie oraz z wykorzystaniem mikroskopii sił atomowych (AFM), skaningowej mikroskopii tunelowej (STM) struktur grafen/TaS<sub>2</sub>. Planowane jest rozszerzenie badań na struktury hybrydowe z TaSe<sub>2</sub> oraz innymi kryształami TMDC.

### **„Badania grafenu płatkowego i jego pochodnych”**

Opiekunowie:

Dr hab. Andrzej Wysmołek, prof. UW, prof. dr hab. Roman Stępniewski

Grafen płatkowy i jego pochodne uzyskiwane z grafitu metodami fizyko-chemicznymi ma wiele potencjalnych zastosowań, szczególnie tam, gdzie zdefektowanie jest raczej zaletą niż wadą. Płatkowy tlenek grafenu oraz zredukowany tlenek grafenu (w założeniu grafen) może być wykorzystany w zastosowaniach np. do przewodzących tuszy, przezroczystych i przewodzących elektrod w ogniwach słonecznych, elektrod w bateriach, superkondensatorach, biosensorach selektywnie reagujących na zewnętrzne bodźce chemiczne w gazach i cieczach.

Właściwości optyczne i elektryczne grafenu płatkowego i jego pochodnych są przedmiotem intensywnych badań. Ciągłe jeszcze wiele procesów zachodzących w tym materiale jest niewyjaśnionych.

Praca licencjacka dotyczyłaby badań optycznych (efekt Ramana, luminescencja, odbicie w świetle spolaryzowanym) pojedynczych płatków oraz struktur warstwowych odkładanych na różnych podłożach (np. na Si, szkło, GaN, BN), które mogłyby być wykorzystane np. do pomiaru wilgotności, czy też detekcji gazów. Niezależnie od znaczenia aplikacyjnego badania te są bardzo interesujące z punktu widzenia zrozumienia podstawowych procesów zachodzących w grafenie płatkowym, tlenku grafenu i zredukowanym tlenku grafenu.

### **„Technologia wzrostu i właściwości optyczne warstw epitaksjalnych azotku boru”**

Opiekunowie:

prof. dr hab. Roman Stępniewski, dr hab. Andrzej Wysmołek, prof. UW,

Azotki stanowią grupę związków chemicznych będących podstawą wielu najnowocześniejszych urządzeń optoelektronicznych takich jak efektywne źródła światła białego (Nagroda Nobla z fizyki 2014), lasery emitujące w zakresie światła niebieskiego i ultrafioletu czy tranzystory mocy pracujący w zakresie GHz.

Azotek boru jest najmniej zbadanym materiałem w tej grupie. Właściwości strukturalne i optyczne tego materiału są przedmiotem intensywnych badań. Wyjaśnienia wymaga rola defektów i domieszek w procesach rekombinacji promienistej tych materiałów.

Praca licencjacka obejmowała by uczestnictwo w procesach wzrostu warstw BN i związków mieszanych  $Al_{1-x}B_xN$  z wykorzystaniem technologii MOVPE oraz badania optyczne (efekt Ramana, luminescencja, odbicie, absorpcja) otrzymanych warstw. Celem badań będzie poznanie fundamentalnych procesów zachodzących w tych materiałach i ich znaczenia dla możliwości zastosowania BN w optoelektronice.

## **ZAKŁAD STRUKTURY MATERII SKONDENSOWANEJ**

### **Anizotropia magnetokrystaliczna w chromie**

**opiekun: Radosław Przeniosło**

Badania będą dotyczyły sprzężenia między momentami magnetycznymi a strukturą krystaliczną chromu. Badane będą próbki bulk-Cr (tj. standardowe duże kryształy  $> 1\mu\text{m}$ ) oraz nano-Cr (kryształy o rozmiarach ok. 20-50 nm). Powszechnie przyjęta struktura krystaliczna chromu jest regularna typu bcc (ang. body-centered-cubic). Uporządkowanie magnetyczne ma postać modulacji wzdłuż kierunku [100], tj. wzdłuż krawędzi sześcienniej komórki elementarnej. Z jednej strony, w symetrii układu regularnego kierunki [100] [010] oraz [001] są równoważne. Z drugiej strony, zjawiska magnetyczne wyróżniają tylko jeden z nich, tj. [100]. Jest więc bardzo możliwe, że właściwa symetria struktury krystalicznej jest inna niż regularna typu bcc, tzn. że w sieci chromu występuje anizotropia magnetokrystaliczna. Prowadzone będą badania struktury magnetycznej bulk-Cr oraz nano-Cr przy pomocy dyfrakcji neutronów oraz badania struktury krystalicznej bulk-Cr oraz nano-Cr przy pomocy dyfrakcji promieni X i dyfrakcji promieniowania synchrotronowego. Wstępne rezultaty wskazują na efekt złamania symetrii regularnej w chromie. Pytanie o zależność deformacji struktury krystalicznej w nano-Cr od rozmiaru kryształów jest uzasadnione.

### **Uproszczenie opisu struktur krystalicznych o symetrii jednoskośnej.**

**opiekun: Radosław Przeniosło**

Ze względu na niejednoznaczność wyboru układu współrzędnych możliwe jest wiele (pozornie) różnych opisów tej samej struktury krystalicznej. Wiele wpisów w bazach danych krystalograficznych dotyczy podobnych struktur, chociaż ich parametry sieciowe wydają się różne. Jest to szczególnie ważne, gdy mamy do czynienia z przejściami fazowymi w wysokim ciśnieniu albo w niskiej temperaturze. Zdarza się że dwa różne przejścia fazowe tej samej substancji, np. jedno w wysokim ciśnieniu a drugie w niskiej temperaturze, prowadzą do dwóch bardzo podobnych struktur, ale ze względu na wybory układów współrzędnych (stosowane przez różnych autorów w literaturze) podobieństwa tego nie widać. Celem pracy licencjackiej będzie napisanie programu sprawdzającego równoważność sieci opisanych przez różne komórki elementarne. W dalszej części pracy, program ten będzie użyty do przeszukania wybranych rekordów bazy danych struktur krystalicznych ICSD w celu znajdowania podobnych do siebie struktur.