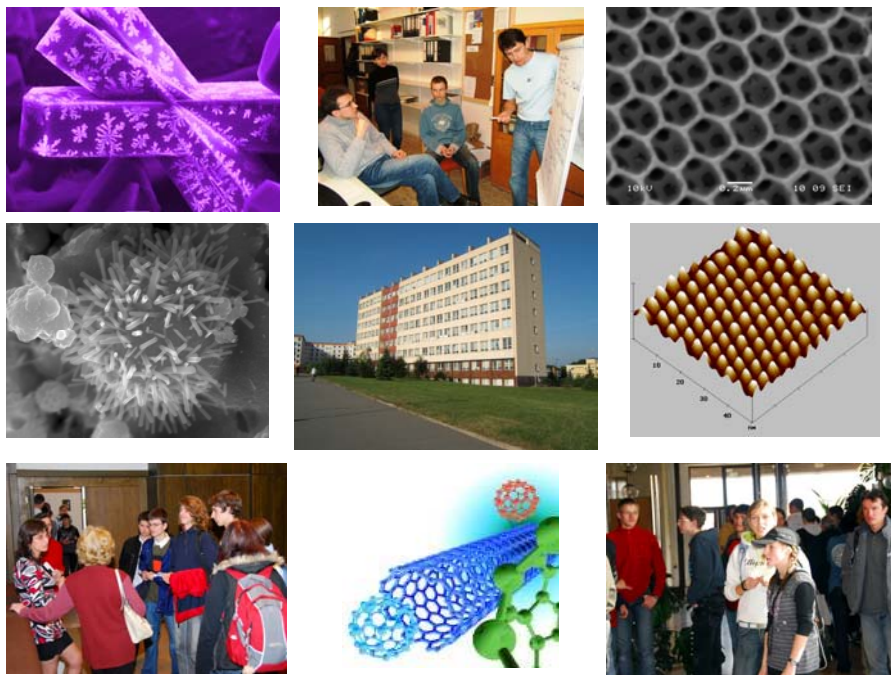


Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.



Léto chemiků 2009

**Program červnových odborných stáží
7 středoškolských studentů
z moravských gymnázií**

8.6.-12.6. (19.6.) 2009

Program je finančně podpořen projektem 2E08038 z programu MŠMT NPV II - Lidské zdroje.



Léto chemiků 2009 – program pro studenty v rámci řešení projektu *Tři nástroje* (MŠMT - 2E08038) v období červen- srpen 2009, zařazeno v programu studentských stáží a praxí.

Týden 8.-12.6.(19.6.) 2009 – stáž 7 studentů z moravských gymnázií...

**Celkem 7 studentů: Gy Brno Řečkovice: M.Kejda, J.Mašek, A.Mašková, B.Pavlíková
Gy Tišnov: T.Žižlavský**

St. pracující v projektu Badatel UP Olomouc: O.Ryparová, J.Krist

(Jedná se o studenty se zájmem o budoucí studium přír. věd, řešitele prací SOČ, kteří v roce 2008 navštívili ústav v rámci programu exkursí nebo účastníky jiné formy spolupráce, např. spolupráce s proj. Badatel UP Olomouc, - nabídnuta stáž vynikajícím posluchačům, kteří v rámci projektu vykonali své SOČ stáže na UP Olomouc).

*Organizace stáží (finančně zajišťuje projekt 2E08038, ca 2000 Kč/studenta na týden):
ubytování zajištěno v ubytovně ÚFCH JH v jídelně a ubytovně ÚFP. Stravování O (teplý oběd)+V (balíček a nápoj, student si vyzvedává při obědě) zajištěno v ústavní kantýně.
Odborný program zajištěn spoluprací několika pracovníků ze všech oddělení ústavu. Při registraci studenti obdrží sborník s tištěnými informacemi představujícími pracoviště a texty o tématech výzkumu, se kterými se v rámci stáží seznámí (připravuje K. Stejskalová z podkladů od pracovišť, které jsou používány v průběhu roku, např. pro účastníky exkursí na pracoviště, praktik letní školy NANO2008, Dny otevřených dveří aj. akce).*

Odborný program:

(všichni zúčastnění přednášející a vedoucí praktik jsou uvedeni bez titulů)

8.6. 2009

10-11 příjezd a registrace, ubytování
12-13 oběd
13:00 -15:00 přednášky v Brdičkově posluchárně:
13-13:30 J. Žabka – Atmosferický výzkum – planeta Titan....
13:30-14:00 M. Hromadová – Současné trendy v elektrochemii.....
14:00-14:15 přestávka
14:15-14:45 T. Navrátil: Elektrochemie ve studiu biologicky aktivních látek

9.6. 2009

9:00-12:00 návštěva pracoviště biospektroskopie Oddělení biofyzikální chemie, praktikum - ukázka měření v laboratoři ... vede J. Humpolíčková (m. 212, 214, 218...)

12-13 oběd

13:00 -14:00 Brdičkova posluchárna, K. Stejskalová – stručný přehled informací o organizaci vědy v AV ČR a ÚFCH JH... (v úvodu krátké seznámení s prof. R.Zahradníkem).

14:00-16:00 studenti: Mašková, Mašek, Pavlíková – pracoviště elektronové mikroskopie L. Brabce Odd. struktury a dynamiky v katalýze - praktikum - ukázka měření ... (m.331)

14:00-15:00 studenti: Kejda, Žižlavský, Ryparová, Krist: stručný přehled grantových projektů řešených v ústavu, představení projektu budovaného Centra inovací, projektu Tři

nástroje a další organizace práce se studenty v ÚFCH JH, webové prezentace ústavu apod. – K. Stejskalová, m.106.

10.6. 2009

9:00-12:00 návštěva pracoviště klastrů v molekulových paprscích Oddělení fotochemie, spektroskopie a iontové chemie, praktikum - ukázka měření v laboratoři ... vede M. Fárník (m. 01 suterén)

12-13 oběd

13:00 -14:00 exkurse na pracoviště ústavu (všichni studenti):

13-13:20 J. Pinkas, pracoviště organokovové katalýzy Odd. SYNKAT (m.418)

13:25-13:45 P. Pracna, pracoviště laserové spektroskopie Odd. OFSICH (m.04 A)

14:00-16:00 studenti: Kejda, Žižlavský, Ryparová, Krist – pracoviště elektronové mikroskopie L. Brabce Odd. struktury a dynamiky v katalýze - praktikum - ukázka měření (m.331).

14:00-15:00 studenti: Mašková, Mašek, Pavlíková: stručný přehled grantových projektů řešených v ústavu, představení projektu budovaného Centra inovací, projektu Tři nástroje a další organizace práce se studenty v ÚFCH JH, webové prezentace ústavu apod. – K. Stejskalová, m.106.

11.6. 2009

9:00-12:00 Exkurse do společné laboratoře NMR (ÚFCH JH a ÚMCH), zajišťuje J.Dědeček a J.Brus, odjezd od ústavu v 9.00, začátek exkurse v laboratoři ca od 10:00, odborný program do 12:00.

Oběd – formou balíčku (studenti si vyzvednou v kantýně před odchodem z ústavu v 9:00).

12-12:30 přeprava na VŠCHT

12:30 exkurse na VŠCHT(zajišťuje K. Stejskalová, FCHI- ACH a FCH), odborný program do 15 hodin.

12.6. 2009

9:00-9:30 návštěva Odd. teoretické chemie, ukázka výzkumu v oddělení, návštěva pracoviště s výpočetními klastry ... vede R. Čurík (m. 108)

9:30-10:00 přestávka (K.Stejskalová, m.106 - bude využita k vyřízení formalit s ukončením stáže, informace o dotazníku zhodnocujícím stáž jejími účastníky aj.)

10-12:30 návštěva skupiny hmotnostní spektrometrie Oddělení fotochemie, spektroskopie a iontové chemie, praktikum - ukázka měření v laboratoři ... vede P.Španěl (m. 217)

12:30 oběd a po té ukončení programu stáží, odjezd studentů z Gy Řečkovice a Tišnov.



Posluchači projektu Badatel UP Olomouc O. Ryparová a J. Krist pokračují v týdnu od 15. do 19.6. dalším programem v ústavu a mimo něj v rámci pracovišť AV ČR a VŠ.

15.6.2009

Téma dne – molekulární elektrochemie

Dopoledne (začátek programu bude upřesněn). Návštěva Odd. molekulární elektrochemie, ukázka výzkumu v oddělení, studentům se věnuje Alan Liška, student PřF UK a náš PVS stážista, a J.Ludvík (m. 514).

Po obědě bude program pokračovat návštěvou PřF UK - spolupracující pracoviště vedené P.Vojtíškem, doprovod A. Liška.

16.6.2009 – začátek v 9:30

Téma dne - nové materiály

V úvodu dne navštíví pracoviště J. Rathouského – téma: fotokatalýza, kde právě zahajuje svou odbornou praxi student MSSCH v Praze a absolvují sním společné seznámení s laboratoří a zaměřením jejího výzkumu.

Studenti dnes mj. absolvují i tzv. „natačecí den“, neboť v ústavu se budou pořizovat záběry do videošotů o dvou laboratořích : pracoviště M. Kalbáče s Ramanovým spektrometrem (Odd. elektrochemických materiálů) a pracoviště P. Kubáta – laserová spektroskopie.(Odd. fotochemie, spektroskopie a iontové chemie) a záběry do spotu k výstavě Příběh kapky.

Po té absolvují ukázkou měření na Ramanově spektrometru pod vedením M. Kalbáče v jeho laboratoři. Oběd dopoledne v kantýně, ukončení programu během odpoledne.

17.6.2009

Téma dne – od všeho něco...

V dopoledních hodinách ústav navštíví několik posluchačů akce MFF UK Fyzikální týden 2009. Pro ně je připraven krátký program: přednáška o ústavu a exkurse na několik fyzikálně-chemických pracovišť. Naši studenti s nimi absolvují tento připravený program.

Po obědě absolvují exkursi na několik pracovišť ÚACH AV ČR v Řeži – doprovod K. Stejskalová. Návrat do ústavu v odpoledních hodinách.

18.6.2009

Téma dne – atmosférický výzkum

Odjezd 7:30 z parkoviště před ústavem.Celodenní exkurse a absolvování měření na pracovišti Aerodynamický tunel, tj. ve Společné laboratoři Ústavu termomechaniky a ÚFCH JH, zajišťuje Zdeněk Zelinger (atmosferická chemie). Studenti s ním pojedou do Nového Knína (automobilem).

Balíček s O si studenti vyzvednou již 17.6.2009 při obědě!

Předpokládaný návrat – nejpozději v podvečer.

19.6.2009

Téma dne – mikroskopie rastrovací sondou – pohled do mikrosvěta

9:30-12:00 návštěva týmu mikroskopie rastrovací sondou Odd. elektrochemických materiálů - ukázka výzkumu v týmu a měření na mikroskopu (AFM a STM metody) ... vede Pavel Janda, m. 05

Oběd.

Po obědě ukončení programu stáže a vyřízení organizačních záležitosti spojených s jejím ukončením (např. dotazník) – K.Stejskalová.

*Na následujících stránkách studenti naleznou tištěné informace o pracovištích,
se kterými se v rámci přednášek, praktik a exkursí v programu
Léto chemiků 2009 seznámí.*

Pracoviště skupiny biospektroskopie, Oddělení biofyzikální chemie

Doc. Dr.rer.nat. Martin Hof

Mgr. Aleš Benda. Ph. D.

T.: 266053142, ales.benda@jh-inst.cas.cz

Přístrojové vybavení:

- (1) Invertovaný konfokální časově rozlišený fluorescenční mikroskop Confocor1 (Zeiss)
- (2) Časově rozlišený fluorescenční spektrometr 5000 U SPC Lifetime System (IBH)
- (3) Fluorescenční spektrometr FL3-11 (Jobin Yvon)
- (4) Jednopaprskový absorpční spektrometr Helios γ (UNICAM)
- (5) Nulový monochromatický elipsometr EL X-04 (DRE)
- (6) Langmuir-Blodgetovy váhy 612D-RB (Nima Technology)
- (7) příprava vzorků: extruder, sonikátor, UV/ozone lampa



Krátký popis zaměření laboratoře:

Fluorescence a s ní spjaté metody patří mezi nejvíce se vyvíjející obory studující živou přírodu (life science). Její přednosti jsou specifická, citlivost a neinvazivita, což umožňuje studovat i živé organismy. Fluorescence ve viditelné oblasti spektra je vlastnost specifická zejména pro některé organické molekuly s rozsáhlým systémem delokalizovaných elektronů, nazývaných fluorofory. Tato specifická fluorescence umožňuje studovat i jinak velmi složité systémy. Vlastnosti emitovaných fotonů (vlnová délka (energie), polarizace, doba života excitovaného stavu) jsou závislé na okolí daného fluoroforu a tím nám poskytují cenné informace o studovaném systému.

V naší laboratoři se kromě vývoje a aplikace nejnovějších trendů ve fluorescenční spektroskopii (např. vývoj časově rozlišené fluorescenční korelační spektroskopie) zabýváme třemi hlavními tématy:

1. Charakterizace „biologické vody“ v lipidových membránách

Hlavním zdrojem informace o studovaném systému je v tomto případě doba života excitovaného stavu molekuly. Ta se může využít k rozložení klasického bezčasového emisního spektra na tzv. časově rozlišená emisní spektra (TRES – Time-Resolved Emission Spectra), která obsahují řadu informací o mikroviskozitě a mikropolaritě chemického okolí měřeného barviva. Analýza těchto spekter je principem metody nazývané „Relaxace rozpouštědla“ a přináší nám informace o stupni hydratace membrán v závislosti na jejich složení a interakci s okolím.

2. Studium kondenzace DNA pro nevirální genovou terapii (NVGT)

Jedním z problémů NVGT je dopravit velkou molekulu DNA do jádra cílové buňky. Důležitým krokem tohoto procesu je kondenzace DNA, kdy se přidáním vhodných činitelů docílí vratného kolapsu DNA na velikost nezbytnou pro její transport do buněk. Právě změna velikosti a tím i difusního koeficientu (mobility) je parametrem měřitelným na úrovni jednotlivých molekul pomocí fluorescenční korelační spektroskopie (FCS). Jejím principem je statistická korelační analýza fluorescenčního signálu pocházejícího z velmi malého detekčního objemu (méně než femtolitr, vytvořený zaostřeným laserovým paprskem) a tím i malého počtu (jednotky) fluorescenčních molekul. Měřená změna difusního koeficientu indikuje účinnost jednotlivých kondenzátorů a stabilitu vzniklé nanočástice.

3. Studium vlastností podporovaných lipidových membrán a jejich interakcí s proteiny

Přes značné pokroky je studium buněčných membrán na živých buňkách stále velmi náročné. Proto v praxi nacházejí velké uplatnění různé modelové systémy, mezi něž patří i lipidové membrány adsorbované na pevných površích. V naší laboratoři se zabýváme studiem vzniku těchto membrán, jejich vlastnostmi a interakcí s antimikrobiálními peptidy. Mezi studované parametry patří mobilita membrány (FCS), kinetika změn její tloušťky a hustoty (elipsometrie) a její homogenita (AFM).

FLUORESCENČNÍ KORELAČNÍ SPEKTROSKOPIE

Lenka Beranová, Jana Humpolíčková, Martin Hof

*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8
lenka.beranova@jh-inst.cas.cz*

Klíčová slova: fluorescenční korelační spektroskopie, autokorelační funkce, konfokální mikroskop, dvoubarevná fluorescenční korelační spektroskopie, časově rozlišená fluorescenční korelační spektroskopie

Obsah

1. Úvod
2. Experimentální uspořádání
3. Autokorelační funkce
4. Tripletní stav fluoreskující molekuly
5. Korelace dvou různých signálů a dvoubarevná FCS
6. Časově rozlišená FCS
7. Závěr

1. Úvod

Mít možnost sledovat proteiny nebo nukleové kyseliny na úrovni jednotlivých molekul je přáním všech, kdo se snaží objasnit klíčové procesy v živých buňkách. Jednou z technik, která se snaží toto přání naplnit, je fluorescenční korelační spektroskopie (FCS). Metoda vznikla v 70. letech 20. století¹. Od té doby se podařilo výrazně zlepšit její experimentální uspořádání a byla využita v širokém spektru biologických aplikací včetně měření uvnitř živých buněk^{2,3}.

Fluorescenční korelační spektroskopie využívá konfokální mikroskop. Nevytváří se při ní ale skenováním obraz vzorku jako v klasické konfokální mikroskopii. Principem této metody je sledování časových fluktuací intenzity fluorescence pocházející z malé ohniskové oblasti mikroskopu. Tyto fluktuace jsou způsobeny difuzním pohybem fluoreskujících molekul.

Mikroskop je zaostřen do malé oblasti – detekční objem je asi 1 femtolitr. Vzhledem k tomu, že sledujeme vzorky s řádově nanomolární koncentrací fluorescenčně označených molekul, je v tomto objemu průměrně pouze jedna fluoreskující molekula. Na fluktuacích signálu se proto výrazně projeví pohyby jednotlivých molekul – například to, jak molekuly termálním pohybem přicházejí do detekčního objemu a jak ho opouštějí. Ze statistické analýzy časově proměnlivého fluorescenčního signálu pak lze určit průměrnou dobu, po kterou molekula zůstává v detekčním objemu, difuzní koeficient a koncentraci dané látky. Pro určení těchto parametrů je potřeba sledovat fluktuace několik desítek minut až několik hodin.

Můžeme zkoumat roztok *in vitro*, vnitřek živých buněk nebo jejich membránu. Lze získat informace o dějích, které ovlivňují difuzní koeficient určité molekuly – například sbalení proteinu nebo nukleové kyseliny, protein-proteinové interakce, navázání substrátu na protein, navázání molekuly na membránu.

2. Experimentální uspořádání

Experimentálním zařízením pro FCS je invertovaný konfokální fluorescenční mikroskop (obr. 1). Používá se objektiv s velkou numerickou aperturou, většinou s vodní imerzí. Laserový paprsek excitačního světla je fokusován do zkoumaného vzorku. Vytváří ohnisko, jehož velikost je limitovaná difrakcí. Fluorescence excitovaných molekul je snímána objektivem a pomocí dichroického zrcadla a emisních filtrů je oddělena od excitačního záření. Do detekční části optické dráhy je umístěna konfokální štěrbin (pinhole) o průměru 40 – 100 nm, která efektivně blokuje světlo, které pochází z oblastí mimo ohniskovou rovinu. Velikost detekčního objemu (oblasti, ze které snímáme fluorescenci) je asi 0,3 – 1,0 femtolitrů (obr. 2).

Jinou možností je použití dvoufotonového fluorescenčního mikroskopu. Pro excitaci dvěma fotony je zapotřebí mnohem vyšší hustota záření než pro jednofotonovou excitaci, proto se výrazně omezí oblast, ve které jsou molekuly excitovány. V tomto uspořádání už není potřeba použít pinhole. Výhodné je také, že se zmenšením excitované oblasti omezí fotodestrukce vzorku – to je zvláště důležité u intracelulárních měření.

FCS klade velké požadavky na použitá fluorescenční barviva. Stejně jako při tradiční spektroskopii je důležitý vysoký účinný průřez absorpce a kvantový výtěžek fluorescence, navíc hraje velkou roli fotostabilita barviva, které musí vydržet vysokou intenzitu světla v ohnisku mikroskopu. Mezi používaná barviva pro FCS patří například skupina barev Alexa s různými excitačními a emisními vlnovými délkami, rhodaminy a cyaniny. Používají se také fluorescenční proteiny – různé formy GFP a DsRed.

3. Autokorelační funkce

Informace o pohybu jednotlivých molekul lze získat statistickou analýzou fluktuací fluorescenčního signálu. Vytváříme tzv. autokorelační funkci $G(\tau)$. Ta je definována

$$G(\tau) = \frac{\langle \delta F(t) \cdot \delta F(t + \tau) \rangle}{\langle F(t) \rangle^2}, \quad (1)$$

kde $\langle \rangle$ značí průměrnou hodnotu v čase a δ okamžitou odchylku signálu od jeho průměrné hodnoty:

$$\langle F(t) \rangle = \frac{1}{T} \int F(t) dt, \quad (2)$$

$$\delta F(t) = F(t) - \langle F(t) \rangle. \quad (3)$$

Autokorelační funkce ukazuje, jak souvisí intenzita fluorescence s intenzitou fluorescence po určité časové prodlevě τ (viz obr. 3). Z fluktuujícího fluorescenčního signálu (část měření je schematicky znázorněna na obr. 3A) určíme $G(\tau)$ pro různé intervaly τ . Typický tvar autokorelační funkce je na obrázku 3B. Pro $\tau = 0$ dává funkce podle rovnice (1) druhou mocninu průměrné relativní odchylky.

Autokorelační funkce má své maximum pro malé τ , pro delší časy τ funkce klesá k nule. Proč vypadá právě takhle? Zkusme to kvalitativně vysvětlit. Do detekčního objemu difuzním pohybem přicházejí jednotlivé molekuly označené fluorescenčním barvivem a zase z něj odcházejí. Ve zjednodušeném příkladu budeme předpokládat, že je v něm buď jedna fluoreskující molekula, nebo žádná. V okamžiku, kdy v detekčním objemu molekula je, je odchylka od průměrné hodnoty fluorescence δF kladná, v okamžiku, kdy tam není, záporná. Pokud je časový interval τ natolik malý, že je pravděpodobné, že pokud na jeho začátku byla v detekčním objemu fluoreskující molekula, tak na jeho konci tam tatáž molekula stále ještě je

(na začátku i na konci intervalu je $\delta F > 0$), případně, pokud tam na začátku molekula nebyla, pravděpodobně se tam nestačí za daný časový interval žádná objevit (na začátku i na konci intervalu je $\delta F < 0$), pak součin odchylek na začátku a na konci intervalu bude většinou kladný a jeho vystředováním přes celé měření dostaneme kladné číslo. Pokud zvolíme dlouhý časový interval τ , v detekčním objemu se během něj vystřídá několik různých molekul. Intenzita fluorescence na začátku intervalu nijak nesouvisí s intenzitou na konci. Součin odchylek na začátku a na konci intervalu má náhodné hodnoty, někdy kladné, někdy záporné. Při vystředování přes celé měření dostaneme nulu.

Časový interval τ_D , pro který má autokorelační funkce poloviční hodnotu než má ve svém maximu, pak můžeme považovat za průměrnou dobu, po kterou se jedna molekula zdržuje v detekčním objemu.

Odchylku od průměrného fluorescenčního signálu v čase t je možné vyjádřit jako

$$\delta F(t) = \int W(\mathbf{r}) \delta(\eta C(\mathbf{r}, t)) d\mathbf{r}, \quad (4)$$

kde integrujeme přes detekční objem. C je lokální koncentrace částic, η parametr nezávislý na prostorových souřadnicích, který určuje počet fotonů detekovaný z jedné částice za jednu sekundu (závisí na celkové intenzitě excitačního světla, účinnosti detekce, účinném průřezu absorpce světla a kvantovém výtěžku fluorescence). $W(\mathbf{r})$ udává prostorové rozložení emitovaného světla. Často se aproximuje třídimenzionální Gaussovou funkcí

$$W(\mathbf{r}) = e^{-2\frac{x^2+y^2}{r_0^2}} \cdot e^{-2\frac{z^2}{z_0^2}}, \quad (5)$$

kde z_0 udává charakteristický rozměr detekčního objemu ve směru optické osy mikroskopu a r_0 rozměr v ohniskové rovině.

Pokud budeme předpokládat, že u částic, které sledujeme, se parametr η nemění v čase a částice se pohybují volnou difuzí ve třech dimensích, je možné odvodit teoretický tvar autokorelační funkce:

$$G(\tau) = \frac{1}{V_{eff} \langle C \rangle} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{\tau}{\tau_D}\right)} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{r_0}{z_0}\right)^2 \cdot \frac{\tau}{\tau_D}}}. \quad (6)$$

V_{eff} je efektivní detekční objem,

$$V_{eff} = \pi^{\frac{3}{2}} \cdot r_0^2 \cdot z_0, \quad (7)$$

τ_D je tzv. difuzní čas, parametr udávající, jak dlouho je částice v detekčním objemu, souvisí s difuzním koeficientem D fluoreskující molekuly vztahem

$$\tau_D = \frac{r_0^2}{4D}. \quad (8)$$

Pokud tedy naměříme fluktuující fluorescenční signál po dostatečně dlouhou dobu, spočítáme autokorelační funkci podle vztahu (1) a proložíme ji teoretickou závislostí (6), můžeme získat důležité informace o sledovaném systému: difuzní čas τ_D , který charakterizuje rychlost pohybu molekul ve vzorku, průměrný počet částic („particle number“ – PN) v detekčním objemu

$$PN = \frac{1}{G(0)} = V_{eff} \langle C \rangle, \quad (9)$$

a pokud známe rozměry detekčního objemu, můžeme určit difuzní koeficient a koncentraci dané látky.

4. Tripletní stav fluoreskující molekuly

Při odvozování předchozích vztahů jsme předpokládali, že se v čase nemění fluorescenční vlastnosti fluoroforu – parametr η . Pro reálná fluorescenční barviva to ale neplatí. Po excitaci ze základního singletního stavu do excitovaného singletního stavu může totiž barvivo přejít do tripletního stavu. Přechod z tripletu zpět do základního singletního stavu trvá řádově delší dobu než vyzáření fluorescenčního kvanta. V této době molekula nemůže vyzářit foton. To se projeví tmavými intervaly, během kterých molekula procházející detekčním objemem nesvítí. Díky tomuto „blikání“ fluoroforu se změní tvar autokorelační funkce v oblasti krátkých časů τ (viz obr. 4).

Pokud platí, že doba života tripletního stavu je řádově menší než τ_D , lze tyto děje oddělit:

$$G_{celk}(\tau) = G_{pohyb}(\tau) \cdot X_{triplet}(\tau). \quad (10)$$

Dynamiku tripletního stavu můžeme vyjádřit vztahem

$$X_{triplet}(\tau) = \frac{1 - T + T \cdot e^{-\frac{\tau}{\tau_{tr}}}}{1 - T}, \quad (11)$$

Kde τ_{tr} je relaxační čas tripletního stavu a T je podíl částic, které se nacházejí v tripletním stavu.

Naměřené autokorelační funkci pak můžeme proložit křivkou

$$G(\tau) = \frac{1 - T + T \cdot e^{-\frac{\tau}{\tau_{tr}}}}{1 - T} \cdot \frac{1}{PN} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{\tau}{\tau_D}\right)} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{r_0}{z_0}\right)^2 \cdot \frac{\tau}{\tau_D}}}. \quad (12)$$

Analogicky jako přechod do tripletního stavu můžeme do analýzy autokorelační křivky zahrnout další rychlé jevy, které způsobují přechody mezi stavem, kdy molekula fluoreskuje a mezi stavem, kdy nesvítí, a zároveň neovlivňují difuzní koeficient molekuly.

5. Korelace dvou různých signálů a dvoubarevná FCS

Kromě autokorelační funkce lze také spočítat korelaci dvou různých signálů (kroskorelaci). V tomto případě sledujeme podobnost jednoho signálu s jiným signálem po daném časovém intervalu τ .

Typické využití kroskorelace dvou signálů je v dvoubarevné fluorescenční korelační spektroskopii^{4,5}. Při použití této techniky se dva druhy molekul označí dvěma fluorescenčními barvivy, které mají dostatečně odlišné emisní vlnové délky. Fluorofory jsou vybuzeny excitačním světlem o dvou různých vlnových délkách. Pomocí dichroického zrcadla a filtrů je rozlišena jejich fluorescence. Je detekována dvěma detektory. Můžeme pak spočítat autokorelační funkce jednotlivých komponent i jejich kroskorelaci. Tato technika se používá například při sledování vytváření komplexů dvou molekul.

U dvoubarevné FCS je nicméně obtížné nastavit optickou aparaturu tak, aby se přesně překrývaly oba fokusované svazky o různých vlnových délkách. Tento problém lze omezit při dvoufotonové excitaci – lze najít dvojice barviv s dostatečně vzdálenými maximy emisního spektra, které je možné excitovat zářením o jedné infračervené vlnové délce⁶.

6. Časově rozlišená FCS

Časově rozlišená fluorescenční korelační spektroskopie (fluorescence lifetime correlation spectroscopy – FLCS)⁷ využívá spojení dvou experimentálních přístupů – FCS a TCSPC (časově korelovaného čítání fotonů). Umožňuje rozlišit ve směsi fluorofory, které se liší dobou života. Lze tak získat autokorelační funkce jednotlivých fluoroforů i jejich kroskorelaci.

Vzorek je excitovaný laserovými pulsy o délce 1 ps až 1 ns s opakovací frekvencí v řádu desítek MHz. Pro každý foton přicházející na detektor jsou zaznamenány dva časy: „makročas“, který zaznamenává polohu registrovaného fotonu na kontinuální časové ose od začátku experimentu, a „mikročas“, který udává, jaká doba uplynula mezi posledním laserovým pulsem a zaregistrováním daného fotonu. „Makročas“ je měřený s přesností v řádu sto nanosekund, „mikročas“ s přesností v řádu desítek pikosekund. V „makročase“ se projeví difuze molekul, přechody do tripletního stavu a podobně. Hodnota „mikročasu“ nám poskytuje informace o průběhu dohasínání fluorescence fluoroforu, ze kterého byl daný foton emitován⁸.

V jednoduchém případě zkoumáme vzorek složený ze dvou komponent označený dvěma barvivy s odlišnými dobami života fluorescence. U obou barviv musíme dopředu znát jejich průběh dohasínání (viz fluorofor A a fluorofor B na obr. 5). Z průběhu dohasínání jednotlivých barviv a z dohasínání měřeného vzorku (údaj získaný z „mikročasu“ přicházejících fotonů) je možné spočítat statistické filtry f_A a f_B (viz obr. 6). Tyto filtry určují, ke kterému fluoroforu se s jakou vahou mají přiřazovat fotony přicházející v určitých „mikročasech“. Například pokud přijde foton velmi brzy po laserovém pulzu, je pravděpodobnější, že pochází od fluoroforu A. Do průběhu intenzity fluorescence fluoroforu A, ze které se pak počítá autokorelační funkce komponenty označené fluoroforem A, se tak tento foton započítá s koeficientem $f_A = 1,5$. Celkově se ale tento foton smí započítat pouze jednou, proto se do průběhu intenzity fluorescence komponenty označené fluoroforem B započítá s koeficientem $f_B = -0,5$. Pro fotony přicházející ve vyšších „mikročasech“ je pravděpodobnější, že patří fluoroforu B, proto se započítají s kladnou vahou do intenzity fluoroforu B a se zápornou vahou fluoroforu A (viz obr. 6).

Použitím filtrů vzniknou ze signálu celého vzorku dva oddělené signály – od komponenty označené fluoroforem A a od komponenty označené fluoroforem B. Jejich intenzity fluktuují v čase (v našem označení se jedná o „makročas“). Z těchto signálů můžeme spočítat jak autokorelační funkce obou komponent, tak jejich vzájemnou kroskorelaci.

Výhodné je využít FLCS při zkoumání procesů, při kterých se mění doba života fluorescenčního barviva v důsledku změny jeho nejbližšího okolí. Příkladem takového děje je kondenzace DNA. Interkalační barvivo, kterým je DNA obarvená, má jinou dobu života ve zkonzenzované a nezkonzenzované molekule DNA. Proto můžeme sledovat zvlášť signál od nezkonzenzovaných a zkonzenzovaných molekul DNA a získat tak bližší informace o mechanismu sbalení řetězce DNA⁹.

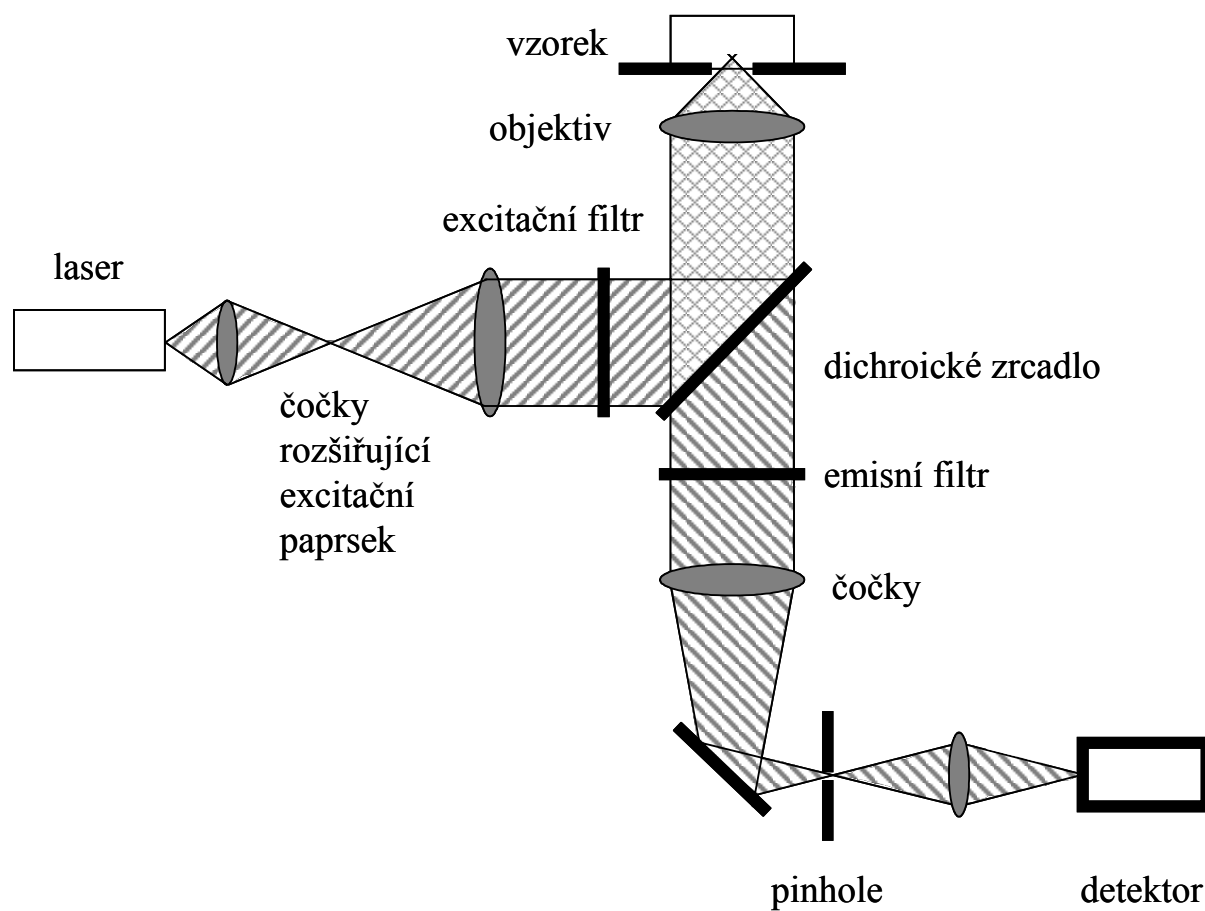
7. Závěr

Fluorescenční korelační spektroskopie (FCS) měří a analyzuje fluktuace fluorescenčního signálu způsobené difúzním pohybem fluorescenčně značených molekul. Z těchto fluktuací je možné určit difúzní koeficient dané látky a její koncentraci. V dvoubarevné FCS se navíc

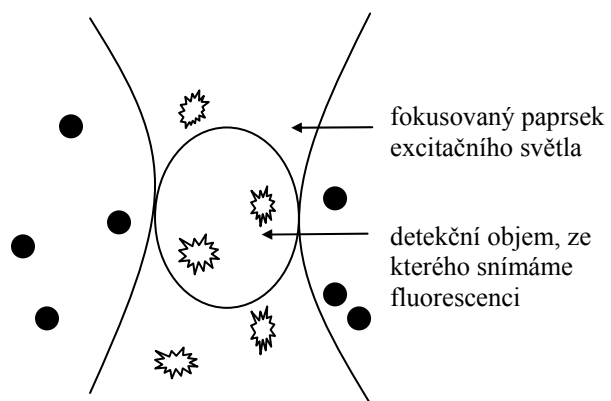
kroskorelují signály pocházející ze dvou skupin molekul označených barvivy s odlišným emisním spektrem. Tato metoda je vhodná pro sledování vytváření komplexů. Časově rozlišená FCS je založená na použití pulsní excitace, umožňuje rozlišit signály pocházející od fluorescenčních značek, které se liší dobou života.

L. Beranová, J. Humpolíčková, M. Hof (*J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague*): **Fluorescence Correlation Spectroscopy**

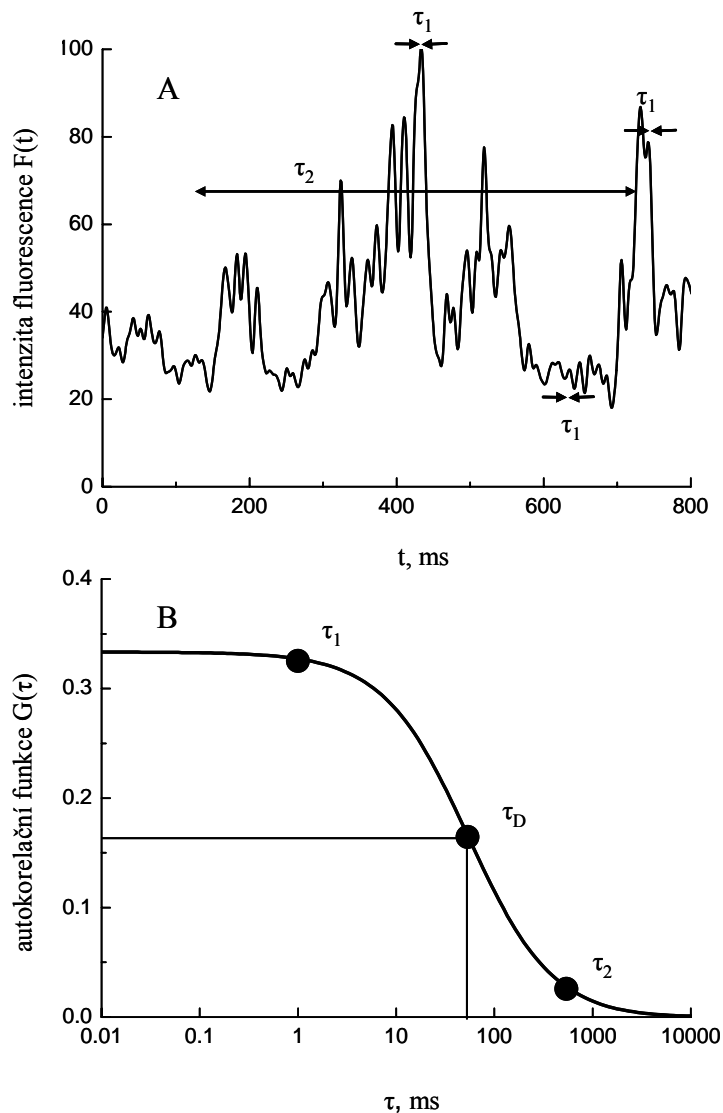
The review explains basic principles of fluorescence correlation spectroscopy (FCS). This method reveals diffusion coefficient and concentration of fluorescently labeled objects by studying temporary fluctuations of fluorescence signal caused by diffusion through focal volume of confocal microscope. In dual-color FCS crosscorrelation of two signals from molecules labeled with two spectrally shifted dyes allows to observe mutual interactions between the two molecules. Fluorescence lifetime correlation spectroscopy uses pulsed laser excitation and enables to distinguish between signals from two dyes with different lifetimes.



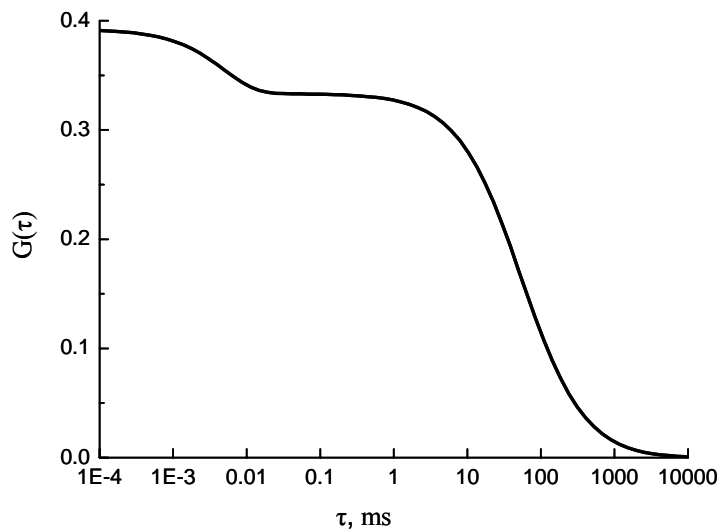
Obrázek 1: Schéma konfokálního mikroskopu.



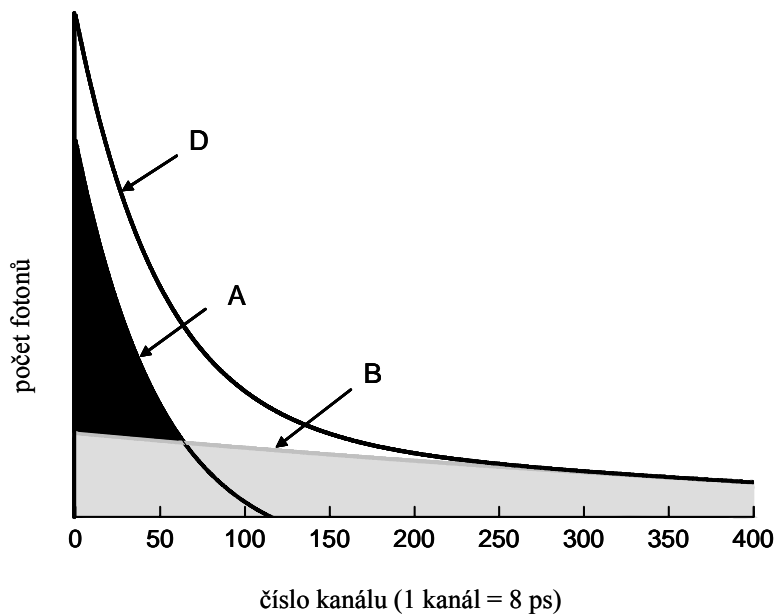
Obrázek 2: Detekční objem v ohnisku mikroskopu.



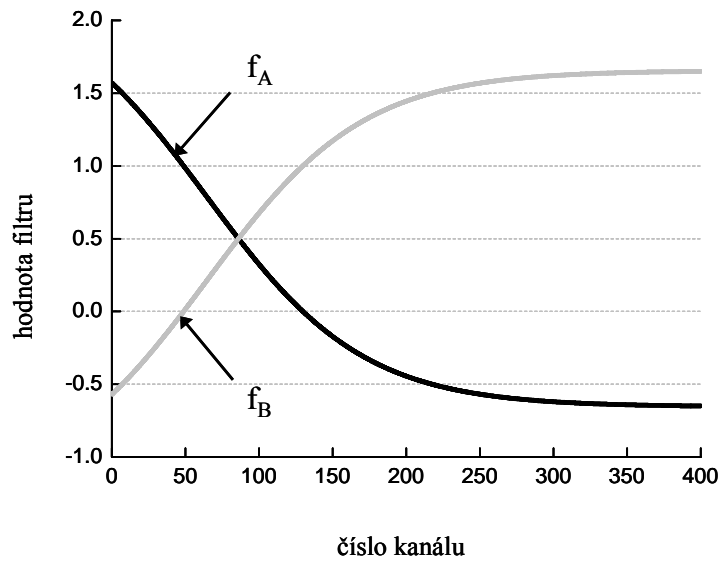
Obrázek 3: Vytvoření autokorelační funkce: část A – naměřené fluktuace fluorescenčního signálu, část B – autokorelační funkce. Pro krátké časové intervaly (τ_1) je hodnota autokorelační funkce velká, pro větší časové intervaly (τ_2) se snižuje, protože hodnoty intenzity fluorescence na začátku a na konci intervalu už spolu nesouvisí. Čas τ_D udává dobu, po kterou se fluoreskující částice průměrně zdržuje ve fokálním objemu. Autokorelační funkce odpovídá hodnotám $PN = 3$, $\tau_D = 54$ ms, $z_0/r_0 = 7$.



Obrázek 4: Tvar autokorelační funkce při přechodu barviva do tripletního stavu ($PN = 3$, $\tau_D = 54$ ms, $z_0/r_0 = 7$, $T = 0,15$, $\tau_R = 5$ μ s).



Obrázek 5: Dohasínání směsi dvou fluorescenčních barviv (A – fluorofor s kratší dobou života, B – fluorofor s delší dobou života, D – dohasínání fluorescence ve směsi fluoroforů A a B).



Obrázek 6: Statistické filtry pro dvě fluorescenční barviva (A – fluorofor s kratší dobou života, B – fluorofor s delší dobou života).

1. Magde D., Elson E. L., Webb W. W.: *Biopolymers* 13, 29 (1974).
2. <http://www.biophysics.org/education/schwille.pdf>, staženo 22. dubna 2008.
3. Medina M. A, Schwille P.: *Bioessays*. 24, 758 (2002).
4. Thompson N. L., Lieto A. M., Allen N. W.: *Curr. Opin. Struct. Biol.* 12, 634 (2002).
5. Schwille P., Meyer-Almes F. J., Rigler R.: *Biophys. J.* 72, 1878 (1997).
6. Heinze K. G., Koltermann A., Schwille P.: *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 97, 10377 (2000).
7. Böhmer M., Wahl M., Rahn H., Erdmann R., Enderlein J.: *Chem. Phys. Lett.* 353, 439 (2002).
8. Kapusta P., Wahl M., Benda A., Hof M., Enderlein J.: *J Fluoresc* 17, 43 (2007).
9. Humpolíčková J., Benda A., Sýkora J., Macháň R., Kral T., Gasinska B., Enderlein J., Hof M.: *Biophys. J.* 94: L17 (2008).

Pracoviště pro výzkum klastrů v molekulových paprscích

(oddělení chemické fyziky – skupina laserové spektroskopie a fotochemie)

Kontakt: Mgr. Michal Fárník, Ph.D.

T.: 266053206, 26605367; michal.farnik@jh-inst.cas.cz

Přístrojové vybavení:

(1) Vakuová aparatura na molekulové paprsky: zdroje paprsků založené na supersonické expanzi plynů do vakua; možnost rozptylového experimentu ve zkřížených paprscích za podmínek jediné srážky; dopování klastrů molekulami; analýza rychlostí a úhlových rozdělení paprsků; UHV komora obsahující WM TOF spektrometr (kolmo na osu paprsku) k analýze kinetické energie fotodisociačních fragmentů; UHV komora obsahující kvadrupólový hmotnostní spektrometr (v ose paprsku) k analýze složení klastrů.

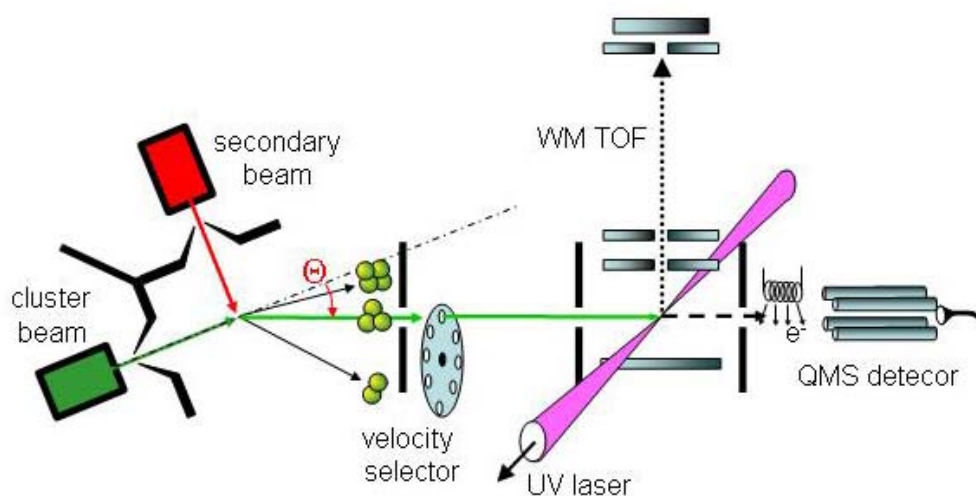
(2) Pulsní laserový systém laditelný v UV oblasti od 217 nm do 432 nm: Nd:YAG laser (Quanta Ray GCR-5, Spectra Physics); barvivový laser (LDL 20505, LAS); wavelength extender (WEX-2C, Spectra Physics) obsahující několik krystalů pro nelineární míchání frekvencí.

Krátký popis zaměření pracoviště:

Pracoviště se zabývá studiem klastrů od Van der Waalsovsky vázaných komplexů vzácných plynů po heterogenní molekulové klastry relevantní v atmosférické chemii. Unikátní experimentální zařízení umožňuje široké spektrum pokusů. Ojedinělou možností přístroje je *velikostní selekce neutrálních* klastrů deflekční metodou ve zkřížených paprscích. Tuto možnost lze využít např. k měření rozpadu po *ionizaci klastrů vzácných plynů* známé velikosti. Výsledky těchto měření lze přímo srovnávat se sofistikovanými teoretickými výpočty.

Klastry lze rovněž využít jako „kryo-nanolaboratoře“ např. k „syntéze“ nových *molekul inertních plynů*. Teoretické předpovědi i experimenty v maticích nedávno odhalily novou třídu chemicky vázaných molekul vzácných plynů typu HRgX (Rg= Ar, Kr, Xe; X= elektronegativní skupina), jejichž studium podstatně přispívá k rozšíření a chápání pojmu chemické vazby. Nedávné experimenty na našem stroji v Göttingen ukázaly, že tyto molekuly lze připravit i v plynné fázi fotodisociací molekul HX na klastrech vzácných plynů a jejich přípravě a studiu se chceme dále věnovat.

Výzkum *molekulových klastrů* (např. $(\text{H}_2\text{O})_n$, $(\text{NH}_3)_n$ etc.) *dopovaných* různými atmosféricky relevantními molekulami (např. HCl, HBr etc.) je důležité z hlediska procesů probíhajících v atmosféře např. z hlediska tvorby ozonové díry. Bude studováno složení dopovaných klastrů a chemické reakce v nich probíhající metodami hmotové spektrometrie. Dále bude zkoumána fotolýza molekul v klastrech a po menších experimentálních úpravách i interakce klastrů s povrchy.



Obr. 1: Experimentální zařízení pro výzkum klastrů v molekulových paprscích

Nanočástice v molekulových a laserových paprscích

Mgr. Michal Fárník, PhD.

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.

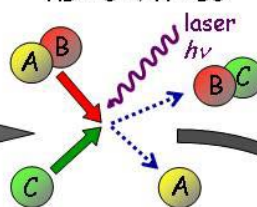
Tato letní škola by Vás měla dovést, jak její název napovídá, cestou „od inženýrské chemie k nanotechnologiím“. Pod „inženýrskou“ ve smyslu „makroskopickou“ chemií se skrývá to, co si běžně pod pojmem chemie představíme nebo pod tímto heslem přečteme v naučných slovnících, tj. věda zabývající se vlastnostmi, složením, přípravou a strukturou různých anorganických a organických látek. Chemik-inženýr například míchá látky v chemických reaktorech, aby připravil novou látku kýžených vlastností. Přitom ovšem obvykle dochází v reaktoru k nesmírnému množství *elementárních reakcí* mezi jednotlivými molekulami, které makroskopický chemik nevidí a na něž může pouze usuzovat z celkového výsledku chemického procesu. Tak trochu se ocitá v roli diváka divadelního představení Shakespearova Hamleta, který si hned po začátku, kdy mu byli představeni hlavní aktéři dramatu, odskočil a vrátil se až při závěrečné scéně a marně se pokouší z těch mnoha mrtvých na scéně a několika přeživších zrekonstruovat celý děj dramatu.

Proto se vědci vydali již dávno cestou „od inženýrské chemie“ k chemii na úrovni jednotlivých molekul a *elementárních procesů* mezi nimi (**obr. 1**), tj. na úrovni ještě detailnější než *nano*-úrovni. Pánové Herschbach, Lee a Polany už v r. 1986 obdrželi Nobelovu cenu za výzkum elementárních chemických procesů, k nimž dochází při srážkách mezi jednotlivými molekulami. Experimentální metodou, která dovolila zkoumat procesy na takto detailní molekulární úrovni, byla *metoda molekulových paprsků* (odvozená z fyziky, kde se atomové paprsky používaly ke studiu atomů již od 20-tých let 20. století – např. známý Sternův-Gerlachův experiment [1]). O této metodě bude také v této přednášce řeč.

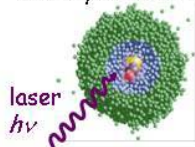
Inženýrská/Makroskopická chemie



Molekulové paprsky
Elementární chemické procesy
 $AB + C \rightarrow A + BC$



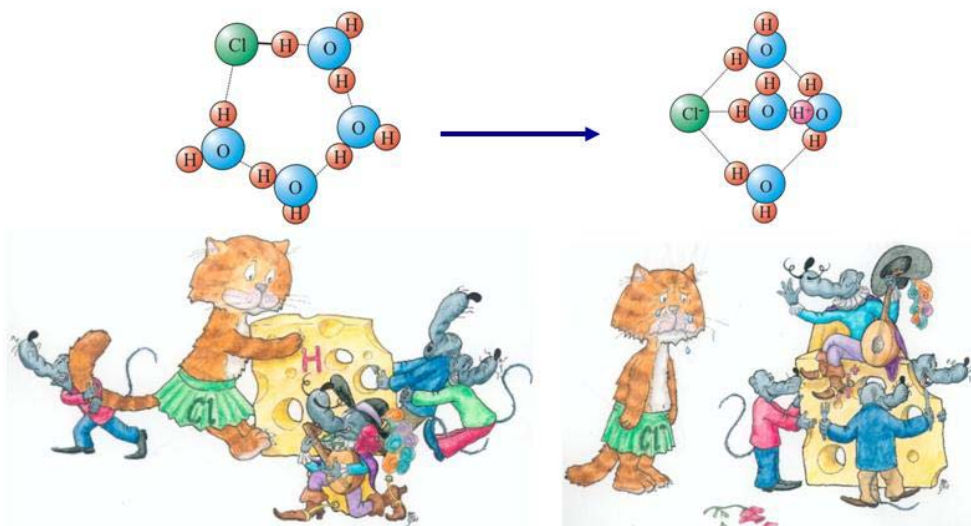
Klastry/nanočástice



Ukazuje se ovšem, že ani znalost jednotlivých elementárních procesů na molekulové úrovni vždy nepostačí k úplnému pochopení chemických dějů na makroskopické úrovni. Chemické reakce se totiž většinou odehrávají za přítomnosti dalších molekul – např. rozpouštědla – které mohou zcela změnit jejich charakter a tudíž i výsledek. Jednoduchý příklad: acidická disociace chlorovodíku, k níž dochází ve vodě:



samozřejmě neproběhne mezi jednou molekulou HCl a jedinou molekulou H₂O. K jejímu průběhu je totiž zapotřebí kolektivního působení vodíkových vazeb několika molekul vody (alespoň čtyři, jak se ukázalo [2]) na roztržení vazby v molekule HCl a vytvoření iontového páru (**obr. 2**). Chceme-li tedy těmto procesům porozumět, musíme se vrátit po ušlé cestě od makroskopické chemie k chemii na úrovni jednotlivých molekul o pár kroků zpět a zkoumat chemii na souborech několika částic, tzv. *klastrů*.

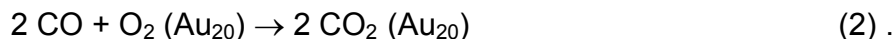


O klastru hovoříme už u souboru dvou molekul, tzv. dimer, ale klastry se také mohou skládat z několika milionů molekul. Větší klastry o desítkách stovkách a více molekulách mají fyzické rozměry řádově *nanometry* – jedná se tedy o *nanočástice*. A právě pomocí těchto klastrů a nanočástic můžeme studovat chemické procesy stále ještě na detailní molekulové úrovni, nicméně nikoliv abstrahované od prostředí látek a vlivu molekul rozpouštědla, jak tomu bylo v případě studia elementárních procesů ve srážkách mezi jednotlivými molekulami. Například výše uvedený proces acidické disociace (1) můžeme studovat v malých klastrech $\text{HCl}(\text{H}_2\text{O})_n$ a sledovat, kolik molekul vody n bude zapotřebí k roztržení kovalentně vázané HCl molekuly a vytvoření tzv. zwitteriontové struktury klastru $\text{Cl}^-(\text{H}_2\text{O})_{n-1}\text{H}_3\text{O}^+$ (obr. 2).

Na druhou stranu lze připravit velké klastry, čili nanočástice, $\text{HCl}(\text{H}_2\text{O})_n$ $n \approx 10^2 - 10^3$ a máme k dispozici modelový systém, na kterém můžeme studovat fotochemii horních vrstev atmosféry, která vede k procesům ničení ozonové vrstvy země. Ukázalo se totiž, že v těchto procesech hrají klíčovou úlohu ledové částice polárních stratosférických mraků, na nichž dochází k reakcím a slunečním zářením indukované fotochemii molekul polutantů, jako je např. HCl. A právě takové reakce můžeme studovat v laboratoři s ledovými nanočásticemi v molekulových paprscích, které podrobíme interakci s ultrafialovým (UV) laserovým zářením simulujícím záření ze slunce. A tím se dostáváme k praktickému významu klastrů a nanočástic.

Nanočástice mnohdy vykazují některé vlastnosti odlišné jak od vlastností jednotlivých molekul či atomů, tak od vlastností makroskopických látek. Vlastnosti látek jsou samozřejmě

dány vlastnostmi molekul a atomů, z nichž se skládají, a interakcemi mezi nimi. Ale ne vždy je vztah mezi vlastnostmi jednotlivých molekul a vlastnostmi makroskopické látky zřejmý či přímočarý. Například zlato je ryzí nereaktivní kov, vzor stálosti a neměnnosti (proto vyrábíme snubní prstýnky ze zlata jako symbol stálosti a neměnnosti vztahu). Na úrovni klastrů o asi 20 atomech se ale zlato mění v prudce reaktivní katalyzátor umožňující oxidaci CO ve výfukových plynech



Takovýto katalyzátor pracuje i při normálních teplotách pod 400 K, kde konvenční katalyzátory již nefungují, což je problém při startu a zahřívání motorů. Ale pozor, klástr složený ze tří atomů už je opět zcela nereaktivní. Proč se reaktivita tak prudce mění s molekulovými rozměry? Na tuto otázku nedostaneme odpověď ani studiem zlata v kondenzovaném stavu ani studiem jednotlivých atomů, ale právě zkoumáním klastrů a nanočástic.

Toho, že vlastnosti nanočástic závisí na jejich velikosti, využíváme k přípravě nanočástic s žádanými vlastnostmi v nanotechnologii. Příkladem takových nanotechnologických postupů byla již výroba vitrážových oken ve středověku: různé zabarvení skel je dáno velikostí kovových nanočástic v materiálu skla rozptýlených. Čili nanotechnologie není zas nic tak moc nového? Empiricky byly nanotechnologické postupy známy již ve středověku a možná ještě dříve již ve starověkém Egyptě. Ale naší snahou není jen využívat empirických znalostí, ale porozumět fyzice a chemii, která se za nimi skrývá.

Velmi zajímavým příkladem je helium. Za normálního tlaku je helium při teplotách nižších než 4.2 K kapalina a při ještě nižších teplotách pod 2.17 K se stává supratekutou kapalinou (tyto hodnoty platí pro ^4He , odpovídající hodnoty pro ^3He jsou nižší). To znamená, že nevykazuje žádný třecí odpor, protéká mikroskopickými kapilárami, „šplhá“ po stěnách nádoby atp. Ovšem tyto zvláštní vlastnosti jsou projevem kolektivního chování helia, u jednoho atomu helia lze těžko o supratekutosti hovořit. Kolik atomů tedy potřebujeme, aby se supratekutost projevila? Na takové a další podobné otázky hledáme odpověď studiem klastrů a nanočástic tak, že sledujeme, jakým způsobem se určitá vlastnost vyvíjí v závislosti na velikosti klastru, tj. na počtu molekul, z nichž se skládá. A jak můžeme měřit supratekutost v heliových klastrech? Obdobně jako v makroskopickém heliu: tzv. *Andronikašviliho experimentem*. Velice zjednodušeně: do kapalného helia vnoříme tenký disk, který budeme roztáčet a přitom měřit tozní sílu potřebnou k překonání tření kapaliny. V okamžiku přechodu do supratekutého stavu nám tato síla klesne na nulu v důsledku vymizení tření. Jak ale vnoříme makroskopický disk do klastru o několika atomech? Ve skupině J. P. Toenniese v Göttingen uskutečnili geniálním způsobem tento experiment měřením rotačních přechodů molekuly „vnořené“ do heliového klastru. A tím se dostáváme k další velice zajímavé aplikaci heliových nanočástic.

Veliké heliové klastry He_n , $n \approx 10^3 - 10^8$, tzv. *nanokapičky*, lze s výhodou využít ke studiu molekul a různých procesů při velmi nízkých teplotách. Tyto klastry připravené v molekulových paprscích ve vakuu se totiž chladí odpařováním atomů He z povrchu. Každý odpařený atom s sebou odnáší ve formě své kinetické energie část vnitřní energie klastru, až se ustanoví určitá rovnovážná teplota klastru. Je to obdobný princip, jakým si naše tělo udržuje konstantní teplotu odpařováním molekul vody z kůže, když se potíme. Pouze s tím rozdílem, že teplota našeho těla je 37°C, zatímco teplota takové heliové nanokapičky je 0.37 K, tj. asi 1000-krát nižší! A toho bychom mohli využít ke studiu molekul a různých procesů při tak nízkých teplotách.

Například k charakterizaci struktury molekul nám dobře slouží infračervená (IR) spektroskopie

vibračních a rotačních stavů molekuly. Ovšem při pokojové teplotě je u větších molekul (více než tříatomových!) s větší hustotou stavů populováno množství nízko ležících stavů, což vede ke vzniku obrovského počtu čar ve spektru. Taková spektra lze pak jen velmi těžko analyzovat. Proto ve spektroskopii využíváme nejrůznějších způsobů chlazení molekul, čímž dochází k populaci pouze několika nejnižších stavů a k podstatnému zjednodušení spekter umožňujícímu jejich analýzu. Čím větší molekula, tím větší je hustota stavů a tím nižší teplota je potřeba. Velmi nízkých teplot molekul (~10 K) lze dosáhnout supersonickými expanzemi, tj. opět technikou molekulových paprsků. Ovšem na úkor hustoty částic a proto je běžnější spektroskopie v maticích.

Matrici představuje např. zmrazený vzácný plyn (Ar, Kr, Xe) v pevném stavu o teplotách řádu desítek K, na jehož povrch se adsorbují zkoumané molekuly a tím se ochladí na stejnou teplotu. Problém při analýze spekter molekul však představuje interakce s matricí, která ovlivňuje strukturu molekul. Proto se používají vzácné plyny jako slabě interagující matrice. Ovšem helium je z tohoto hlediska nevhodné neboť vzhledem k jeho supratekutosti se molekuly do něj vložené okamžitě usadí na stěně nádoby. Ale heliové nanokapičky nám nabízejí velmi nízkou teplotu 0,37 K a supratekuté prostředí, které kromě toho, že molekulu okamžitě ochladí, s ní nebude interagovat. Rotace molekuly nebudou prostředím bržděny a spektrum zkresleno. Vložme tedy molekulu do volně letících nanokapiček v molekulových paprscích. Výrazně teplejší molekula přenesou část své energie na nanokapičku, z níž se odpaří heliové atomy. Postupným odpařováním se kapička ochladí zpět na původních 0,37 K. Na tento systém pak posvítíme IR laserem a změříme spektrum příslušné molekuly. V současné době se vědci snaží tímto způsobem měřit např. spektra velkých biomolekul a získat tak přímou spektroskopickou informaci o jejich struktuře, která je jinak konvenční spektroskopii vzhledem k velikosti molekuly nedosažitelná. Mimochodem tok informací zde funguje i opačným směrem: z IR spekter známé molekuly lze zjistit její rotační teplotu. Molekula tak může fungovat jako citlivý teploměr teploty nanokapiček. Právě teplota a supratekutost He-nanokapiček byla zjištěna ze spekter molekuly OCS.

V právě popsaných experimentech fungují tedy He-nanokapičky jako jakési *létající nanomatrice*. Ovšem rovněž byly uskutečněny experimenty s chemickými reakcemi molekul v He-nanokapičkách při teplotách 0,37 K. Takové procesy jsou relevantní jak pro základní pochopení příslušných reakcí, tak i pro chemii v mezihvězdném prostoru. Tady zase využíváme He-nanokapičky jako *létající nano-kryo-reaktory*. Obecně lze tedy nanokapičky v molekulových paprscích nazvat *létajícími nanolaboratořemi* [4].

Ale nejen heliové, ale i ostatní klastry mají celou řadu fascinujících vlastností a lze je využít jako *létající nanolaboratoře*. Jedním ze zajímavých příkladů přímo z naší laboratoře je syntéza molekul vzácných plynů [5]. Studenti středních škol většinou opouštějí hodiny chemie vybaveni znalostí, že vzácné plyny jsou neslučivé díky tzv. oktetovému pravidlu. Samozřejmě je známa celá řada molekulových species obsahujících atomy vzácných plynů jako van der Waalsovské molekuly např. Ar₂, ArH₂O (což jsou ale spíše klastry) nebo excimery např. ArF, XeCl (které ovšem existují pouze v excitovaném stavu a tudíž krátkou dobu). Běžné jsou ionty ArH⁺, které ale díky chybějícímu elektronu nepodléhají výše zmíněnému oktetovému pravidlu. Poměrně nedávno, v r. 1995, byly však experimentálně objeveny nové molekuly vzácných plynů typu H-Rg-Y, kde Rg je vzácný plyn a Y je elektronegativní atom či skupina např. I, Cl, CCH atp. Tyto molekuly byly připraveny laserovou disociací molekul HY (např. halogenvodíků či acetylenů) v maticích vzácných plynů. Po disociaci a následném zahřátí matrice může vodíkový atom migrovat a zrekombinovat s atomem matrice na molekulu HRgY. V našem

experimentu jsme tyto species vytvořili fotodisociací molekul HY v létajících nanomatricích – Rg_n klastrech. Důležité je, že v našem experimentu se klastr během procesu disociace HY a tvorby HRgY rozpadne a zůstává nám samotná molekula v plynné fázi ve vakuu, což dokazuje stabilitu těchto molekul. Tímto způsobem byly připraveny a dále zkoumány např. molekuly HXeI, HXeCl nebo zajímavá „organoxenonová“ molekula HXeCCH. Je zřejmé, že studium takovýchto molekul je důležité, neboť do značné míry nabourává klasický pohled na chemii a rozšiřuje naše chápání chemické vazby.

Uvedli jsme tedy řadu zajímavých a fascinujících příkladů ze světa volných klastrů a nanočástic. A kudy – jakými nástroji – vědci do tohoto světa vstupují? Nejdříve musíme volné klastry připravit, což děláme technikou *molekulových paprsků*. To ovšem samo o sobě nestačí. Abychom se o klastrech něco dozvěděli, abychom o nich mohli něco říci, prostě abychom je mohli zkoumat, musíme v nich vzbudit nějaký proces, změnu, reakci atp. A to obvykle provádíme – jak bylo ukázáno ve všech výše uvedených příkladech – interakcí klastrů s *laserovými paprsky*. Pak už je třeba zvolit jen vhodnou detekční metodu, např. hmotovou spektrometrii, optickou spektroskopii atp., a vzbuzený proces sledovat.

Na několika málo uvedených příkladech jsme si ukázali, že pomocí studia klastrů a nanočástic v molekulových a laserových paprscích můžeme získat informace o chemických i jiných procesech v látkách probíhajících na detailní molekulové úrovni. A tyto poznatky z nanosvětla slouží nejen k rozšíření poznání světa kolem nás, ale lze je i zpětně využít v makroskopické – „inženýrské“ chemii, kde snáze ovlivníme a využijeme procesy, kterým budeme detailně rozumět. Z pohledu úvodní paralely s divákem Hamleta se pomocí nanotechnologií přesuneme do pozice diváka, který pečlivě a možná i několikrát shlédl celé představení a jedině tak mu může porozumět a vychutnat si ho.

Poděkování: Granty KAN 400400651 a GAČR 203-09-0422

Literatura

- [1] Walther Gerlach, Otto Stern, „*Das magnetische Moment des Silberatoms*“, *Zeitschrift für Physik* **9**, 353-355 (1922).
- [2] William H. Robertson, Mark A. Johnson, „*Caught in the Act of Dissolution*“, *Science* 4 October 2002: Vol. **298**, pp. 69.
- [3] Slava Grebenev, J. Peter Toennies, Andrei F. Vilesov, „*Superfluidity Within a Small Helium-4 Cluster: The Microscopic Andronikashvili Experiment*“, *Science* 27 March 1998: Vol. **279**, no. 5359, pp. 2083 – 2086.
- [4] J. Peter Toennies, Andrei F. Vilesov, K. Brigita Whaley, „*Superfluid Helium Droplets: An Ultracold Nanolaboratory*“, *Physics Today* February 2001: pp. 31-37.
- [5] Petr Slavíček, Milan Ončák, Viktoriya Poterya, Michal Fárník, „*Syntéza v létajících nanoreaktorech: hydridy vzácných plynů*“, *Chemické Listy* **102**, 467 (2008).

Praktikum IX: Laserová chemie v létajících nanolaboratořích

Michal Fárník

michal.farnik@jh-inst.cas.cz; tel: 266053206

Úvod: Klastry jako létající nanolaboratoře

V naší laboratoři se zabýváme volnými klastry a nanočásticemi ve vakuu. Klastry jsou soubory atomů či molekul, které jsou vázány slabými interakcemi, jako jsou např. van der Waalsovské interakce či vodíkové můstky.

Studujeme klastry od *dimérů* až po konglomeráty několika tisíc i více molekul, tzv. *nanočástice*.

Klastry připravujeme *metodou molekulových paprsků* expanzí plynu do vakua skrze trysku o průměru několikadesítem m (hovoříme o tzv. „supersonické expanzi“). V praktiku se studenti blíže seznámí s metodou molekulových paprsků, budou měřit charakteristiky supersonické expanze, jako je rychlostní rozdělení molekul a klastrů a porovnávat je s teoreticky vypočtenými hodnotami.

Dále v našem experimentu využíváme řadu metod, jako např. kvadrupólová hmotnostní spektrometrie, „timeofflight“ spektrometrie kterou využíváme v různých módech jednak k měření hmotnostních spekter ale také k měření kinetické energie fragmentů po fotodisociaci. S těmito technikami budou studenti rovněž názorně seznámeni a v rámci praktika bude provedeno několik měření jak hmotových spekter tak spekter kinetické energie fragmentů jejichž vyhodnocení a interpretace na základě nabitých znalostí bude úkolem pro studenty.

K fotodisociačnímu experimentu, který je hlavním experimentem na naší aparatuře, jsou v laboratoři k dispozici dva ultrafialové (UV) pulsní laserové systémy: (1) Excimerový ArF/F₂ laser pracující na frekvenci 193 nm a (2) laditelný UV systém, který se skládá z vysokovýkonového Nd:YAG laseru, laditelného barvivového laseru a jednotky pro nelineární směšování frekvencí. Principiálně lze směšováním frekvencí v různých nelineárních krystalech jednotky WEX pokrýt rozsah vlnových délek od 217 nm do 400 nm. Oba laserové systémy budou studentům předvedeny a budou použity ve fotodisociačním experimentu.

Experiment: V rámci praktika bude provedeno několik různých experimentů s klastry

- 1) Bude připraven molekulový paprsek klastrů argonu Ar_n pro různé expanzní podmínky odpovídající různým středním velikostem klastrů a budou změřena hmotová spektra klastrů po ionizaci nárazem elektronu.
- 2) Metodou „timeofflight“ bude změřeno rozdělení rychlosti částic v molekulovém paprsku.
- 3) S použitím 5% směsi HBr/Ar budou vytvořeny klastry (HBr)_n (kontrola hmotnostní spektrometrií) a budou prováděny experimenty s fotodisociací těchto klastrů při vlnových délkách 243 a 193 nm při různých expanzních podmínkách. Budou změřena TOF spektra Hfragmentů pomocí „timeofflight“ spektrometru.

Laboratoř organometalické katalýzy

Mgr. Michal Horáček, Ph.D., Mgr. Jiří Pinkas, PhD., RNDr. Karel Mach, CSc.

T.: 266053735; 26605 3736.

e-mail: michal.horacek@jh-inst.cas.cz, jiri.pinkas@jh-inst.cas.cz

¹ **Laboratoř organometalické katalýzy** studuje organometalické sloučeniny počínaje jejich přípravou, přes vlastnosti až k jejich využití.

Jde o chemické sloučeniny, které v sobě spojují organickou část, tvořenou převážně pouze atomy uhlíku, s atomem přechodového kovu.

V popředí našeho zájmu jsou látky, ve kterých v roli kovu vystupuje titan, zirkonium či hafnium a roli organické sloučeniny přebírá aromatický pětičlenný kruh.



Abychom pochopili a dokázali předpovídat děje probíhající během chemických procesů, studujeme chování těchto sloučenin při oxidačně-redukčních dějích. Podařilo se nám například připravit a popsat titanocen s paralelními kruhy, o němž se předpokládalo, že nemůže existovat.

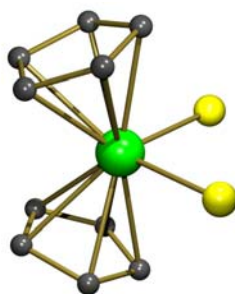
Praktické aplikace sledujeme na řadě katalytických reakcí. Příkladem jsou polymerizace, při nichž z ethylenu či styrenu vzniká polyethylen respektive polystyren.

Laboratoř organometalické katalýzy se nachází ve 4. patře budovy ústavu. Skupina má k dispozici jednu standardně vybavenou laboratoř (36 m²) se dvěma digestořemi, dvěma vakuovými linkami, jednou argonovou linkou; přilehlou laboratoř (18 m²) vybavenou argonovou linkou; a dvě klidové místnosti pro kancelářskou práci a vyhodnocování experimentů.

Hlavní přístrojové vybavení laboratoře je následující: UV-VIS Varian Cary 17 D spektrometr (rozsah 340-800 nm), Nicolet Avatar FT-IR spektrometr (rozsah 400-4000 cm⁻¹), ESR spektrometr ERS-220, jednonábový plynový chromatograf Focus se SSI injektorem a DSQ kvadrupolem, dry box (mBraun, USA – viz přístroj na snímku z exkurse studentů).

V současnosti tým řeší například tyto projekty:

- *Centrum struktury a syntetické aplikace komplexů přechodných kovů*



- *Funkcionalizace cyklopentadienylových ligandů Ti a Zr komplexech silany. Využití Si-H vazeb k syntéze a zakotvení katalyzátorů*
- *Dvojjaderné titaničité komplexy s dvěmi různými prokatalytickými centry*
- *Syntéza titanosilikátů a jejich aplikace*



¹ **Obrázky:** Laboratoř organometalické katalýzy – příprava ligandu lithné soli (vpravo nahoře), exkurse studentů na jedno z pracovišť laboratoře (střed vlevo); připravený titanocen dichlorid (vpravo dole), model titanocen dichloridu (vlevo dole).

Pracoviště „Laboratoř NMR pevného stavu“

Společná laboratoř Ústavu makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i. a Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. (v budově ÚMCH v Praze 6)

Mgr. Jiří Dědeček, CSc. (oddělení struktury a dynamiky v katalýze)

T.: 266053767; jiri.dedecek@jh-inst.cas.cz

Přístrojové vybavení:

NMR spektrometr pevné fáze Bruker Avance 500MHz WB/US s 4 a 2,5 mm CP/MAS a 4 mm CP/MAS X/Y/H sondou. CP/MAS sondy pro měření NMR spekter při rotaci pod magickým úhlem pro širokou řadu jader od ^{15}N do ^{31}P . CP/MAS X/Y/H sonda navrch umožňuje korelační experimenty mezi ^{15}N a ^{13}C a ^{27}Al a ^{29}Si jádry. 4 mm sondy umožňují maximální rotaci frekvencí ca. 18 kHz, 2,5 mm sonda ca. 32 kHz. Uvedené vybavení je vhodné pro realizaci řady experimentů NMR spektroskopie vysokého rozlišení v pevné fázi (např. korelační experimenty, dvojitá krosopolarizace), a to i pro kvadrupolární jádra.



Krátký popis zaměření laboratoře:

NMR představuje velmi účinný nástroj lokální strukturní analýzy. Toho využívá výzkumný program laboratoře, který je v oblasti fyzikální chemie zaměřen třemi směry. Prvním je studium lokalizace a distribuce hliníku (a dalších heteroatomů) v zeolitických hlinitokřemičitanových maticích, kdy ^{27}Al a ^{29}Si MAS NMR spektroskopie představuje jednu z klíčových analytických metod. Zeolitické matrice představují vysoce uspořádané materiály s řadou aplikací od adsorpce a separace přes katalýzu až po optoelektroniku. Distribuce hliníku v těchto maticích představuje jeden z klíčových parametrů kontrolujících jejich vlastnosti. V laboratoři byly vyvinuty postupy pro řízení lokální hustoty hliníku v zeolitu umožňující např. optimalizaci katalyzátorů pro odstraňování oxidů dusíku ze spalin.

Druhým směrem, úzce propojeným s předchozím je studium lokalizace a distribuce kationtů zavedených do mikroporézních (zeolitických) a mezoporézních hlinitokřemičitanových matic. Tyto kationty hrají roli adsorpčních nebo katalytických center a jejich chování je dáno uspořádáním jejich blízkého okolí. MAS NMR spektroskopie představuje jeden z nástrojů umožňujících popsat koordinaci, polohu a distribuci řady kationtů v zeolitických maticích a studovat tak vztah mezi jejich koordinací, lokalizací a chováním na atomární úrovni.

Třetím směrem je strukturní analýza pevných anorganických látek, kdy laboratoř slouží jako servisní centrum využívané i jinými pracovišti.



Pracoviště teoretické fyzikální chemie (Oddělení teoretické chemie)

Kontakty: Mgr. Dr. rer. nat. Jiří Pittner

T.: 266052015, jiri.pittner@jh-inst.cas.cz

Mgr. Roman Čurík, PhD.

T.: 266053256, roman.curik@jh-inst.cas.cz

Výpočetní vybavení

Naši práci provádíme na systémech ("klastrech") skládajících se z několika počítačových jednotek, zpravidla nadstandartně vybavených PC. V současné době máme k dispozici například tyto klastry:

- Orion - 1 čtyřprocesorový, 4 dvouprocesorové a 1 jednoprocessorový 64-bit Opteron, 6 GB RAM, Linux. Je určen pro MRCC výpočty.

Name	Nodes	CPU	CPU freq	RAM	Scratch
javor	1	AMD Opteron 244	1800 MHz	6.0 GB	73 GB
jasan	2	AMD Opteron 250	2400 MHz	6.0 GB	208 GB
jilm	2	AMD Opteron 250	2400 MHz	6.0 GB	208 GB
habr	2	AMD Opteron 250	2400 MHz	6.0 GB	208 GB
buk	4	AMD Opteron 275	2200 MHz	8.0 GB	137 GB
dub	2	AMD Opteron 254	2800 MHz	8.0 GB	137 GB

- Antares - 3 dvou a 3 jednoprocessorové počítače a 1-2 GB RAM, Linux
- Bohr - 10 dvouprocesorových 64-bit počítačů

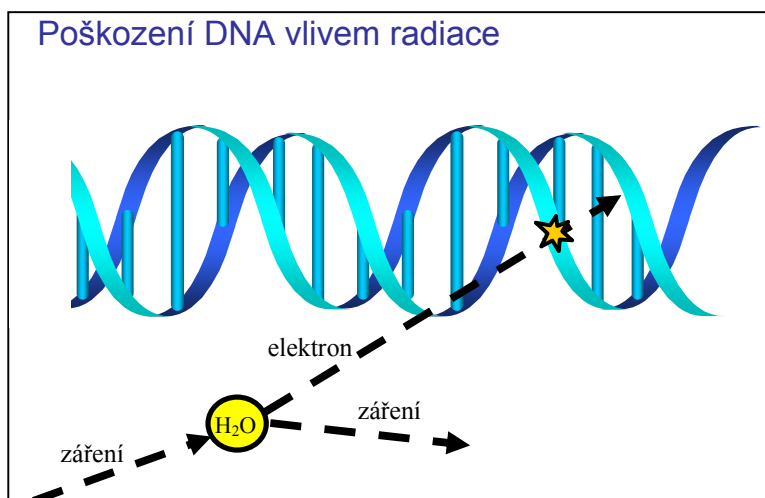
Každému procesoru přísluší jedna fronta, tzn. každá úloha se počítá jen na jednom jádře. Na fyzickém paralelismu se pracuje.

Krátký popis zaměření pracoviště

Srážky elektronů s molekulami nebo ionty hrají důležitou roli v různých oborech biologie, chemie a fyziky. Příklady pro tyto procesy mohou být nalezeny v průmyslových plasmách, planetárních atmosférách, mezihvězdných oblacích nebo i v dějích, které vedou k poškození DNA a k následním mutacím (viz obrázek 1). Elektronová spektroskopie je užitečná technika pro identifikaci chemiabsorbovaných částic, protože umožňuje pozorovat opticky zakázané přechody.

Proto jedním z vědeckých zaměření skupiny je vývoj kvantové metody pro výpočty účinných průřezů srážek elektronů a molekul. Metoda „Discrete Momentum Representation“ (DMR) vyvinutá v naší skupině je v současné době vhodná k popisu elastických srážek a také kolizí, které vedou k přenosu srážkové energie do vibračního pohybu molekuly. Efektivita tohoto přenosu podává informaci o jejím možném roztržení.

V budoucnu je naším cílem zpřesnění současného modelu spolu s jeho rozšířením pro popis přenosu energií do elektronových a rotačních excitací.



Obrázek 1. Před pěti lety bylo prokázáno, že jedním z nejdůležitějších mechanismů poškození DNA, které může vést k mutacím a rakovině, je přerušení vazeb tzv. sekundárními elektrony. Obrázek zjednodušeně naznačuje vznik sekundárních elektronů procesem ionizace okolních molekul vody nebo přímo částí DNA.

Rozhovor na portálu ELiEN s adresou
<http://alien.cz/patrik-spanel.htm>

PATRIK ŠPANĚL



Narodil se v roce 1967 v Praze. V roce 1984 vyhrál fyzikální olympiádu v Portorose, v roce 1990 získal doktorát na Karlově Univerzitě v Praze, v roce 1994 doktorát na Universitě v Innsbrucku a od roku 2002 je čestným profesorem na Keele University. Nyní působí na AV ČR v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského, kde se podílí na výzkumu metod hmotnostní spektrometrie a publikuje v mezinárodních časopisech.

Úsilí vědců zbavuje člověka utrpení

„Během postgraduálního studia v Innsbrucku jsem pracoval na výzkumu reakcí, co probíhají v mezihvězdných oblacích. Tam jsem se seznámil s profesorem, který měl zkušenosti v iontové chemii a společně jsme dospěli k závěru, že bychom chtěli dělat něco užitečného.“

V září minulého roku pořádal Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR v Praze konferenci o využití analýzy dechu v medicíně. Vy jste byl jeden z hlavních organizátorů. Co bylo cílem této konference?

Na konferenci jsme pozvali lidi, kteří jsou specialisté ve svých oborech. Snažili jsme se pozvat lékaře, výzkumníky, inženýry a zástupce firem, které se zabývají produkcí analytických přístrojů. Společným tématem této konference byla vize, jak použít neinvazivní analýzu dechu pro diagnostiku v medicíně. Na konferenci se mluvilo o různých přístrojových metodách, které se mohou použít ke stanovení různých stopových látek v dechu. To souvisí s tím, čím se zabývám já. Vyvíjím jednu konkrétní metodu, která je založena na hmotnostní spektrometrii a která může měřit i velmi malé koncentrace organických látek v dechu.

Mohl byste představit metodu rozboru dechu a jaké je její aktuální využití v medicíně?

Už po století je známo, že některé choroby vedou k přítomnosti látek nebo zápachů v lidském dechu. Třeba cukrovka vede k vůni po ovoci, což je způsobeno acetonem, porucha funkce ledvin vede k pachu, který byl popisován jako vůně rybiny, což je způsobeno čpavkem a aminy. Zatím neexistovaly žádné vědecké nebo objektivní metody, jak tyto látky měřit. Je zřejmé, že analýza dechu by byla neinvazivní, čili příjemnější, než odběry krve a také příjemnější než odběry moči. Bylo třeba zkombinovat přístup několika různých specialistů tak, aby se dali dohromady a mohli spolu komunikovat i přes bariéry jejich úzké specializace. To bylo to, co dosud omezovalo použití. Zatím se běžně v medicíně analýza dechu nepoužívá, i když existují výjimky. Tou je měření izotopu uhlíku ¹³C pro diagnostiku *Helicobacter pylori*, bakterie, která způsobuje žaludeční vředy nebo rakovinu žaludku. Ve výzkumných laboratořích bylo toto objeveno před dvaceti lety, ale teprve až v nedávné době se měření začalo v některých zemích rutinně používat. V České republice se tato diagnostika už

používá. Ještě novější je měření vodíku, které se používá pro diagnostiku poruchy malabsorpce fruktózy a malabsorpce laktózy, což se údajně týká 20-30% populace lidí. Fruktóza je přitom běžně přítomna v průmyslově vyráběných potravinách – v džusech, marmeládách – a může vést k různým nespecifickým poruchám, depresím nebo syndromu únavy. Byl o tom přesvědčen i můj kolega, dr. Ledochowski, který má soukromou lékařskou praxi v Rakousku. Velké množství problémů, které lidé mají, jsou podle něj způsobeny špatným trávením fruktózy. To vede k přemnožení bakterií. Navzdory velkým problémům dokázal prosadit, že diagnostika malabsorpce laktózy a fruktózy pomocí analýzy dechu byla v Německu uznána zdravotní pojišťovnou. Předtím diagnostiku nikdo nefinancoval, peníze na výzkum si sháněl ze soukromé praxe. Když léčil pacienty a byli ochotni platit v hotovosti, tak peníze věnoval na nákup technologie a přístrojů. V současné době se v Německu tato metoda používá a pomáhá ušetřit velké množství lidí od utrpení nebo větších zdravotních komplikací.

Co mohou lidé v tomto směru očekávat dále?

Co zatím neexistuje a co by bylo potřeba, je metoda pro screening cukrovky. Vyšetření jednoduchým způsobem v široké populaci, které by nevyžadovalo dokonce ani rozbor moči. Víze je taková, že by se vzal nějaký přístroj, který by objektivně změřil koncentraci acetonu v dechu a na základě toho by se mohlo člověku doporučit, aby si nechal udělat specifické detailní testy na cukrovku.

Kdy reálně by mohli mít lékaři takové přístroje k dispozici v ordinacích?

Už nyní mají k dispozici přístroje pro měření vodíku, nebo existují laboratorní metody, kdy lékař odebere vzorek, ten se pošle do laboratoře a pak přijde výsledek zpátky na stanovení již zmiňované bakterie *Helicobacter pylori*. Na cukrovku bych dostupnost takových přístrojů očekával tak v horizontu dvou až tří let. Nejdříve ovšem musí vše projít tím, co souvisí s metodou vědecké práce. Medicína je v současné době relativně konzervativní a přístupy, které jsou nové, mohou být odsouzené jako šarlatánství, pokud neprojdou správných klinickým výzkumem. Začíná to dobře navrženou klinickou studií, která je publikována v odborné literatuře. Než lze výsledky publikovat, musí studii přečíst dva až tři odborníci z oboru, kteří s námi nejsou v konfliktu zájmu. Teprve po této publikaci na oponentním základě lze postupovat dále. Proběhnou pilotní testy, metoda se otestuje na dobrovolnících nebo malé skupině pacientů. Myslím, že by nebylo eticky správné, pokud není známo jak vše statisticky funguje, dát nevyzkoušenou metodu analýzy dechu k dispozici běžnému užívání.

Existují alternativní či jiné organizace, které by chtěly tuto metodu využít bez ohledu na to, zda prošla korektním klinickým výzkumem?

V medicíně ne, ale zájem mají například pojišťovny. Zajímají se o objektivní test, zda je někdo kuřák nebo ne. Je to pro ně důležité z hlediska životního pojištění.

Je možné využívat metodu hmotnostní spektrometrie i mimo medicínu?

Ano, existuje množství aplikací. Tato metoda je schopna měřit neobyčejně malá množství látek přítomných ve vzduchu. Na jednu miliardu molekul vzduchu je přítomna jedna molekula stopové látky, kterou lze měřit. Metodu lze použít v potravinářství, například ve výzkumu chuti a vůní. Lidé z potravinářského průmyslu se zajímají o to, jakým způsobem lze zlepšit nebo zkvalitnit chuťové vlastnosti. Další využití je v oblasti bezpečnosti při detekci výbušnin nebo toxických látek, při předcházení teroristického útoku. Metoda, kterou jsme vyvinuli, se používá také při ochraně a bezpečnosti práce celníků v Austrálii. Celní správa se tam bojí toho, že pracovníci prověřující zásilky budou po otevření beden otráveni. Hrozí jim například otrávení jedovatými plyny, které chrání zrní před plísněmi. Celníci potřebovali metodu, kde by osondovali obsah zásilky ještě před tím, než ji otevřou.

Jaké jsou největší bariéry převodu výsledků výzkumu do běžné praxe a komerčního využití?

Největší bariérou uplatnění hmotnostní spektrometrie je cena. Podle současného návrhu stojí přístroje kolem 4 milionů korun. Dalším směrem výzkumu je tedy miniaturizace. Ostatní kroky již nejsou otázkou vědeckého výzkumu. Musí být využit marketing, hledání aplikací a plánování sériové výroby tak, aby se cena postupně začala snižovat. Na příkladu použití hmotnostní spektrometrie pro analýzu dechu lze ukázat, že jde o užitečnou věc, pro kterou však není a priori nějaká poptávka. Navíc určitá skupina lidí musí mít také velký zájem o mezioborovou spolupráci. Ti, co pracují v oboru chemie se musí zajímat i o medicínu, aby spolu mohli komunikovat, a naopak. Velice důležité je, aby se lidé dokázali přeorientovat ze svojí specializace na jinou.

Řekl jste, že pohovoříte ještě více o mezinárodní spolupráci...

Mezinárodní spolupráce byla pro mne v této práci zásadní. Během postgraduálního studia v Innsbrucku jsem pracoval na výzkumu reakcí, co probíhají v mezihvězdných oblacích. Tam jsem se seznámil s profesorem Davidem Smithem, který měl zkušenosti v iontové chemii a společně jsme dospěli k závěru, že bychom chtěli dělat něco užitečného. Něco, co by nebyla jen abstraktní věda, ale abychom mohli vidět, že výsledky naší práce vedou k nějakému skutečnému výsledku. Tam nás napadlo využít metody, ve kterých jsme měli dostatek technických zkušeností k tomu, abychom navrhli přístroj, který bude měřit stopové koncentrace látek. Pak jsme společně začali působit v Anglii na univerzitě v Keelu, kde se nám podařilo najít lékařskou školu, fakultu medicíny, která projevila zájem o tento výzkum. Já i profesor Smith jsme do toho šli s tím rizikem, že se to nepovede. Měli jsme představu, že stojí za to obětovat této práci čas i kariéru. Začali jsme s aplikacemi v oblasti bezpečnosti práce. Britský úřad bezpečnosti práce se o náš výzkum začal zajímat a získali jsme první finanční prostředky. Pak přišly objednávky na první přístroj o hmotnosti 200 kg a my stáli před technickým problémem, jak ještě více zmenšit původní přístroj pro astrochemii s hmotností 2000 kg. To bylo v roce 1996. Před dvěma lety jsme vyvinuli přístroj, který váží 120 kg.

Jakou roli má podle Vás věda ve společnosti?

Začal bych u role vzdělání. Nelíbí se mi názory, že vzdělání je poukázka na úspěšnou kariéru. Vzdělání má hodnotu samo o sobě. Věda je něco, co souvisí se vzděláním. Pro společnost je vzdělání velice důležité, ale to vzdělání musí být založeno na seriózní vědě. Další role vědy je ta, že se nalézají nové metody a postupy. Život lidí je zajímavější a pohodlnější. Přínosná je kombinace několika tvůrčích oborů: vědy, inženýrství a marketingu jako něčeho, co dokáže technologie prodávat.

Podílí se podle Vás česká věda na nejdůležitějších světových projektech?

Nemůžeme mluvit o české vědě, spíše o českých vědcích, kteří jsou napojeni na mezinárodní projekty. Také se nedá říci, které projekty jsou nejdůležitější. Kdyby jste se ptala na čínskou vědu, tak ta si vybírá nejdůležitější projekty podle toho, co se dělalo v USA před deseti lety. Lze se také podívat na seznam Nobelových cen, kde by měly být zpětně ohodnoceny ty nejlepší projekty. Typická prodleva mezi objevem a Nobelovou cenou je zhruba 20 let. Až zpětně se ukáže, že něco bylo důležité. Šance, že se česká věda v současnosti podílí na nejdůležitějších projektech zde je, ale ukáže se až za deset let, které z nich to vlastně jsou.

Růžena Krátká, 15.1.2007

Pracoviště mikroskopie rastrovací sondou, Oddělení elektrochemických materiálů

Ing.Pavel Janda, CSc.T.:266053966, 266052012,
pavel.janda@jh-inst.cas.cz

Přístrojové vybavení:

- 1) Dva mikroskopy rastrovací sondou (Topometrix TMX 2010 a NanoScope IIIa Multimode, Veeco) umožňující zobrazení povrchů pevných látek v rozsahu zvětšení 1000x až přesahující 60 000 000x s rozlišením dosahujícím molekulární resp. atomární úrovně. Mikroskopy využívají základních technik - tunelové mikroskopie (STM) v oblastech pikoampérových až nanoampérových tunelových proudů, elektrochemické mikroskopie (SECM) a mikroskopie atomárních sil (AFM) v kontaktním, semikontaktním a v režimu laterálních sil. Tato kombinace dovoluje studium látek různých fyzikálně-chemických vlastností: od izolantů po vodiče; od gelovitých až po tvrdé povrchy, na vzduchu i pod kapalinou. Vzhledem k propojení mikroskopů s čtyřelektrodoým potenciostatem, je též možné sledování (elektro)chemických dějů in-situ tj. v prostředí (elektro)chemického experimentu. Uvedené přístrojové vybavení a vyhodnocovací software umožňuje získat nejen topografické zobrazení povrchu s kótováním ve všech třech osách (např. drsnost, velikost a výška zrn), ale i fyzikálně-chemické informace (lokální elektrická vodivost, přítomnost funkčních skupin apod.).
- 2) Tříelektrodový potenciostat/galvanostat (Wenking POS2, Bank Elektronik) pracující v oblasti potenciálů -5-+5 V, s rychlostí vkládání potenciálu 0,1 mV/s až 100 V/s je používán v elektrochemických experimentech.



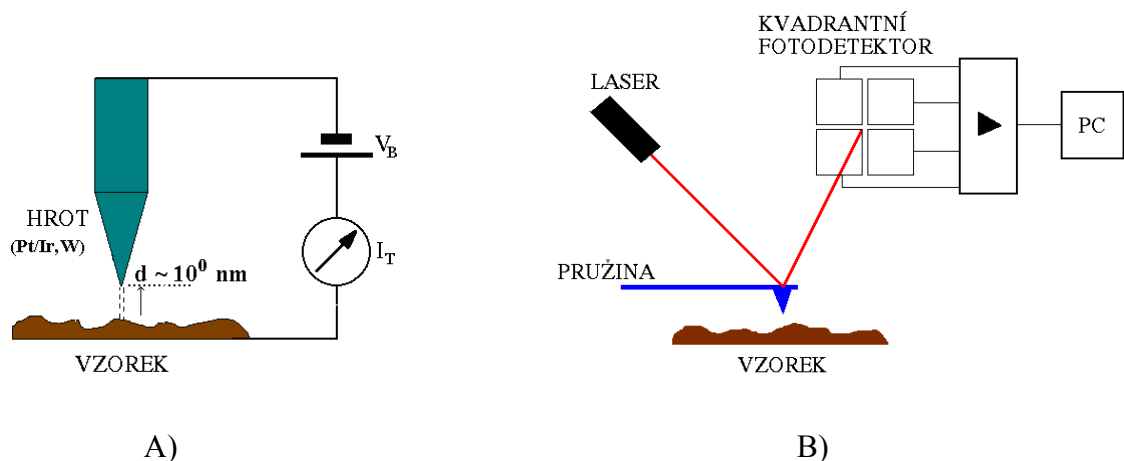
Krátký popis zaměření laboratoře:

Laboratoř se zabývá studiem :

topografie a stability kovových nanočástic imobilizovaných na monokrystalických substrátech a optimalizací jejich vlastností pro použití v elektrokatalýze a senzorech.

reakční kinetiky dějů probíhajících na jednotlivých nanočásticích s využitím metody elektrochemické mikroskopie (SECM).

vlivu nanostruktury, dopování a senzibilizace oxidických polovodičů na konverzní účinnost fotoelektrochemického (Grätzelova) solárního článku.



Obr.1: Schéma principu metody rastrovací tunelové mikroskopie (A), mikroskopie atomárních sil (B)

ÚSTAV FYZIKÁLNÍ CHEMIE J. HEYROVSKÉHO AV ČR, v.v.i. (ÚFCH JH)
Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, www.jh-inst.cas.cz, T.:266052011, director@jh-inst.cas.cz

Ústav rozvíjí badatelskou činnost ve fyzikální chemii a chemické fyzice se zaměřením na vztahy mezi strukturou a reaktivitou látek. Soustřeďuje se zejména na teoretický a experimentální výzkum chemických a fyzikálně-chemických dějů na atomární a molekulární úrovni (struktura a dynamika látek, mechanismus reakcí) v plynné, kapalně a pevné fázi a na jejich rozhraních, a to především v systémech významných pro chemickou katalýzu a sorpční, elektrochemické a biologické procesy (včetně přípravy a charakterizace nových katalytických, sorpčních, elektrodových a jiných speciálních materiálů).

Výzkumná činnost probíhá v 8 odděleních:

- Oddělení teoretické chemie
- Oddělení fotochemie, spektroskopie a iontové chemie
- Oddělení biofyzikální chemie
- Oddělení syntézy a katalýzy
- Oddělení struktury a dynamiky v katalýze
- Oddělení elektrokatalýzy
- Oddělení elektrochemických materiálů
- Oddělení molekulární elektrochemie

Zaměření výzkumu a vývoje

V letech 2005 – 2011 bude výzkum v ÚFCH JH AV ČR, v.v.i. zaměřen především na problematiku výzkumného záměru s názvem „Struktura, reaktivita a dynamika molekulárních a biomolekulárních systémů: teorie, experiment a aplikace“.

Cílem výzkumu je identifikace a objasnění souvislostí mezi strukturou a interakcemi v molekulárních a biomolekulárních systémech a jejich chemickou resp. elektrochemickou reaktivitou a fyzikální dynamikou. Novost záměru spočívá v experimentálním přístupu na atomární resp. molekulární úrovni, který je umožněn rychlým rozvojem spektroskopických a mikroskopických metod s vysokým rozlišením a technik syntézy materiálů v nanoměřítku. Předmětem výzkumné činnosti je:

- vývoj a využití metod kvantové chemie v chemické fyzice, katalýze a elektrochemii,
- kinetika a dynamika chemických procesů v plynné fázi a na povrchích,
- struktura a vlastnosti molekul a jejich agregátů,
- struktura, funkčnost a dynamika biomembrán,
- syntéza a strukturní chemie nanoskopických materiálů,
- mechanismus katalytických a elektrokatalytických procesů,
- sorpční a transportní děje,
- struktura a (foto)elektrochemická reaktivita molekul a biomolekul v kapalných fázích a na mezifázích.

