

Tradice a současnost hmotnostní spektrometrie a chemie iontů v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.



Tato tradice má kořeny v úsilí Jaroslava Heyrovského (Nobelova cena za chemii 1959; obr. vpravo nahoře), aby jeho žáci hledali fyzikálně-chemické principy nových analytických metod.



Vladimír Čermák a Vladimír Hanuš (obr. vlevo nahoře a uprostřed) zkonstruovali v padesátých letech první hmotnostní spektrometr v Československu (obr. vlevo dole) a položili základy rozvoje tohoto oboru u nás. Tento průkopnický čin byl oceněn v roce 1954 státní cenou.



Vladimír Hanuš rozvinul pak výzkum v hmotnostní spektrometrii organických molekul a biomolekul a je považován ve světě za jednoho z pionýrů v této oblasti.

Vladimír Čermák se zabýval srážkovými procesy iontů a vyvinul metodu elektronové spektroskopie Penningovy ionizace, jedinou spektroskopickou metodu vzniklou u nás. Spolu se Zdeňkem Hermanem se zabýval také výzkumem chemických reakcí iontů s molekulami v plynné fázi.



Zdeněk Herman později vypracoval nový způsob výzkumu dynamiky chemických reakcí iontů metodou rozptylu ve zkřížených paprscích částic (obr. vpravo dole) a dodnes v této oblasti pracuje. Jeho výzkumy byly oceněny udělením Ceny Alexandra von Humboldta v Německu (1992) a u nás cenou „Česká hlava 2003“ za celoživotní dílo (obr. vpravo uprostřed).



Patrik Španěl vyvinul unikátní metodu založenou na hmotnostní spektrometrii v proudové trubici s vybranými ionty (SIFT-MS)

Naděje pro pacienty na bezbolestné vyšetření při diagnostice některých chorob poskytne výzkum skupiny hmotnostní spektrometrie Oddělení fotochemie, spektroskopie a iontové chemie ÚFCH JH. P. Španěl se s svým týmem vyvinul obecnou metodu přesného výpočtu stopových koncentrací látek ve vzduchu na základě výsledků experimentálního a teoretického výzkumu kinetiky vzniku a zániku iontů v proudové trubici s vybranými ionty. Tato metoda umožňuje přesné stanovení látek vyskytujících se v poměru jedné molekuly na miliardu molekul vzduchu, a to bez ohledu na vlhkost, a výrazné zmenšení rozměrů a hmotnosti měřicího přístroje. Jeden z prvních takových přístrojů na světě byl uveden do provozu ve skupině hmotnostní spektrometrie v roce 2006 (obrázky vpravo). Detailní rozbor procesů v plazmatu iontového zdroje, který je součástí tohoto přístroje, umožnil další zvýšení citlivosti a optimalizaci detekčního limitu metody SIFT-MS. Autoři dále získali původní a nová data pro koncentrace metabolitů jako amoniaku, acetonu a kyanovodíku přítomných v dechu populace zdravých dobrovolníků od 4 do 83 let. V současnosti jsou ve spolupráci s nemocnicí Na Homolce zkoumány možnosti metody SIFT-MS pro diagnostiku astmatu a nemocí zažívacího traktu a ve spolupráci se Státním zdravotním ústavem diagnostika bakterií komplikujících onemocnění cystickou fibrózou. V poslední době také zkoumají možnosti použití této nové metody pro odhalování výbušnin. Publikované práce v oboru SIFT-MS mají značný mezinárodní ohlas dokumentovaný stovkami citací od specialistů navazujících na jejich výsledky.



Michal Fárník zavedl v ústavu světově unikátní experimentální zařízení umožňující studium volných nanočástic relevantních například v chemii atmosféry i v biofyzice

Nové světově unikátní experimentální zařízení pro studium volných klastřů a nanočástic metodou molekulových paprsků ve vakuu M. Fárník instaloval v r. 2005 v ÚFCH JH (obrázky vlevo) a v uplynulých 5 letech se mu s jeho týmem podařilo úspěšně rozvinout zahájený výzkum do nových směrů:

1) Byly studovány nanočástice relevantní v chemii atmosféry, např. při procesu tvorby ozonové díry. Byla provedena řada experimentů s nanočásticemi vody dopovanými molekulami halogenvodíků $HX \cdot (H_2O)_n$ ($X=Br, Cl$). Experimenty doplněné teoretickými výpočty ukázaly, že laserovou excitací se v systému $HX(H_2O)_n$ vytváří neutrální molekula H_3O -hydronium radikál. V těchto systémech dochází k acidické disociaci halogenvodíků v základním stavu na ionty X^- a H_3O^+ , tj. vzniká tzv. "zwitterionická" struktura, která je pak excitována UV zářením do radikálového neutrálního stavu H_3O . To může mít zásadní význam pro porozumění a modelování procesu tvorby ozonové díry, kde zvýšení absorpčního průřezu halogenvodíků v iontové disociovaném stavu na ledových částicích polárních stratosférických mraků způsobí, že tyto specie mohou být dodatečným přímým zdrojem atomárního chloru či bromu ve stratosféře.

2) Malé biomolekuly jako např. pyrol často představují UV-aktivní chromofor ve větších molekulách a jejich fotochemie má zásadní význam pro fotostabilitu biomolekul. To je otázka relevantní v tak důležitých procesech, jako je radiační ničení molekul DNA. Proto jsme studovali fotolýzu pyrolu v prostředí klastřů a ukázali vliv solventu, který jsme opět ve spolupráci s teoretiky interpretovali.

3) Fotodisociací molekul v klastrech vzácných plynů lze vytvářet nové molekuly inertních plynů. Tyto sloučeniny jsou významné zejména z hlediska základního výzkumu neboť podstatně rozšiřují naše chápání chemické vazby. V r. 2008 se v našem experimentu podařilo poprvé v plynné fázi připravit organoxenonovou molekulu $H-Xe-CCH$ a byla studována její následná fotodisociace.

