

TISKOVÁ ZPRÁVA

Praha 8. října 2021

Akademie věd ČR
Národní 1009/3, 110 00 Praha 1
www.avcr.cz

SOLOŽITÉ VĚTVENÍ CHEMICKÝCH REAKCÍ LZE PŘEDPOVÍDAT. NOVOU TEORII A METODU VYVINULI VĚDCI Z OBORU VÝPOČETNÍ CHEMIE

Vědět, k jakým produktům povede určitá chemická reakce, má zásadní význam pro návrh ekologicky přijatelného postupu v chemické syntéze. Vědci z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR formulovali novou teorii umožňující rozvětvené chemické reakce předpovídat. Vyvinuli také metodu, jak syntézu prvků nasměrovat k co nejefektivnějšímu, i pro životní prostředí šetrnému výsledku. O práci českých vědců informoval odborný časopis *Chemical Science*.

Složitá síť chemických přeměn je všudypřítomným hnacím motorem dějů v přírodě i uvnitř lidského těla. Klíčovou roli v tom, zda a jak se chemická reakce bude odehrávat, hraje tzv. energetická bariéra, která zabezpečuje i to, aby nevznikl nežádoucí vedlejší produkt. Někdy příroda tuto energetickou bariéru sníží a danou reakci zvýhodní před ostatními.

Se vzrůstajícím počtem chemických reakcí, které vědci objasnili, je ale zřejmé, že tato kontrola nezabrání následným rozvětveným reakcím, které mohou nakonec vést k různým produktům, včetně nežádoucích a škodlivých.

Tým Martina Srnce z oddělení výpočetní chemie Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR nyní přišel s novou teorií. Poskytuje přesnou a spolehlivou předpověď, kterého z možných produktů rozvětvené reakce vznikne více a s jakým přebytkem a jak případně nasměrovat takovou reakci k produktu, jenž je žádoucí.

„Spolu s teorií jsme vyvinuli také metodu levného výpočtu a jednoduché analýzy distribuce kinetické energie reakčního systému na vrcholu energetické bariéry, přičemž procento úspěšnosti předpovědi je srovnatelné nebo vyšší než u mnohem výpočetně náročnějších metod,“ říká Martin Srnec.

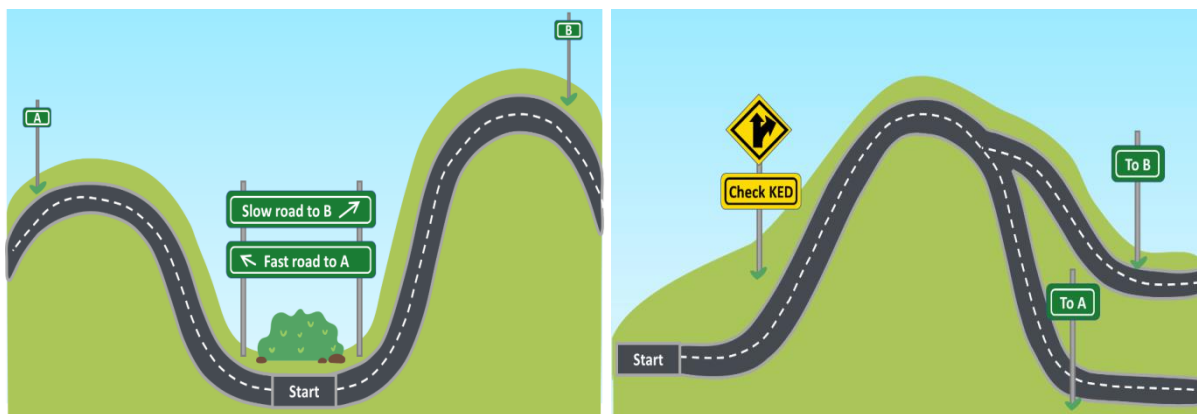
Nová teorie a metoda je důležitá pro výzkum v organické a biosyntetické chemii, zejména proto, že nové poznatky umožní vývoj produktů šetrnějších k životnímu prostředí.

Odkaz na publikaci: <https://doi.org/10.1039/D1SC02826J>

Více informací: RNDr. Martin Srnec, Ph.D.
Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR
martin.srnec@jh-inst.cas.cz

Kontakt pro média: **Markéta Růžičková**
Divize vnějších vztahů AV ČR
press@avcr.cz
+420 777 970 812

Fotogalerie



Energetický profil paralelních (schéma vlevo) a rozvětvených (schéma vpravo) chemických reakcí – energetickou bariéru si lze představit zjednodušeně jako kopec, na který je potřeba vylézt, aby se chemická reakce nastartovala.

FOTO: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR