








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



chemie
životní prostředí
fyzika katalýza
energie zdravotnictví
molekuly
nanomateriály



-  twitter.com/JHINST_Prague
-  facebook.com/jhinst
-  [ustav_heyrovskeho_av](https://instagram.com/ustav_heyrovskeho_av)
-  linkedin.com/company/ufchjh-prague
-  Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR



Úvod

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, veřejná výzkumná instituce, rozvíjí vědecký odkaz nositele Nobelovy ceny, profesora Jaroslava Heyrovského v oborech spojených s fyzikální chemií. Soustavnému základnímu i aplikovanému výzkumu se u nás věnuje přes dvě stě vědkyň a vědců, od nadějných mladých badatelek a badatelů, po světově uznávané špičkové odbornice a odborníky. Teoreticky poznané a experimentálně získané znalosti fyzikálně chemických dějů probíhajících v molekulách a atomech mají význam pro průmyslovou katalýzu, výrobu a uchovávání energie, zdravotnictví i životní prostředí.

V ústavu působí **Heyrovského centrum transferu technologií**, které se zabývá podporou spolupráce mezi ústavem a komerčním sektorem s cílem propojení výzkumného a technologického potenciálu ústavu s potřebami komerční sféry.

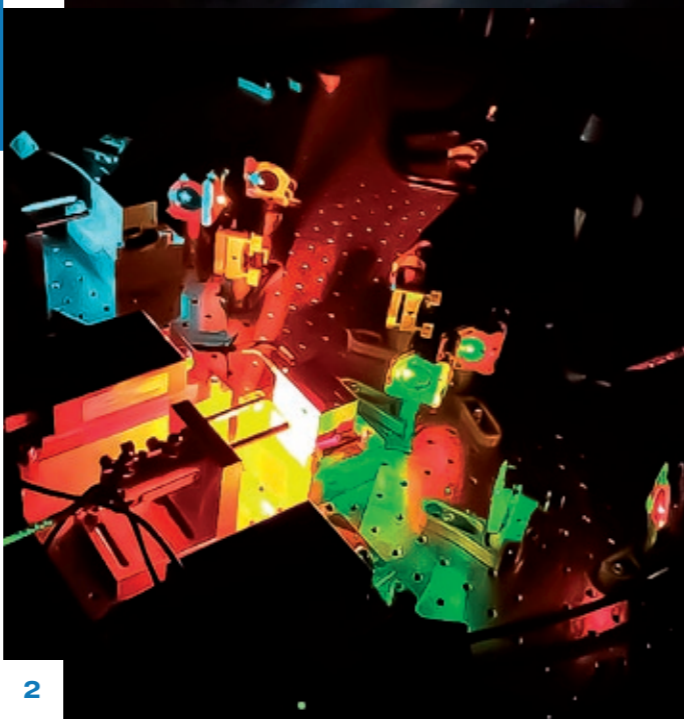


Biofyzikální chemie

Oddělení biofyzikální chemie řeší dvě základní výzkumné linie využívající fluorescenční spektroskopii a mikroskopii („biospektroskopie“) a elektrochemické metody („bioelektrochemie“). Za podpory výpočetních přístupů směřují oba výzkumné směry ke společnému cíli: porozumět struktuře, funkci a dynamice biologicky relevantních systémů na molekulární a atomistické úrovni. Prováděný výzkum se přitom zabývá aktuálními tématy souvisejícími s neurodegenerativními onemocněními, buněčnou signalizací, imunitní odpovědí, genovou terapií a enzymologií.



1



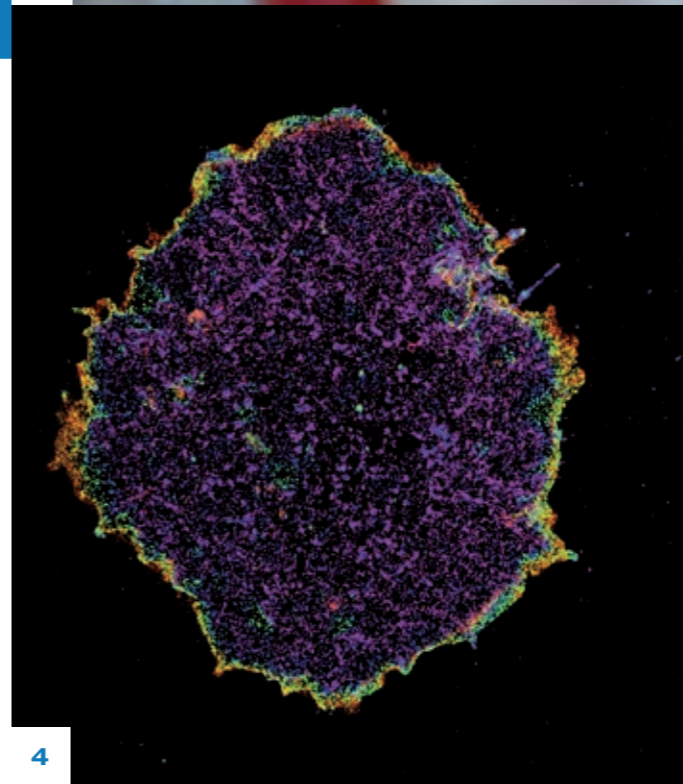
2

1 Měření na fluorescenčním mikroskopu

2 Fluorescenční mikroskop s vysokým rozlišením



3



4

3 Příprava DNA nanostruktur

4 Obrázek bílé krvinky zobrazené fluorescenčním mikroskopem



Zaměřujeme se na:

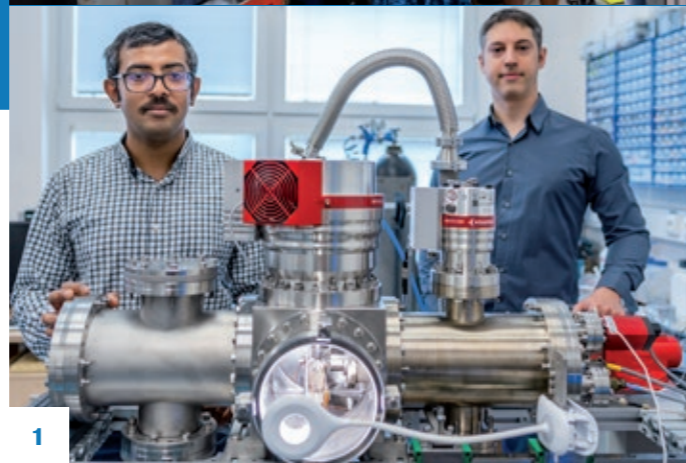
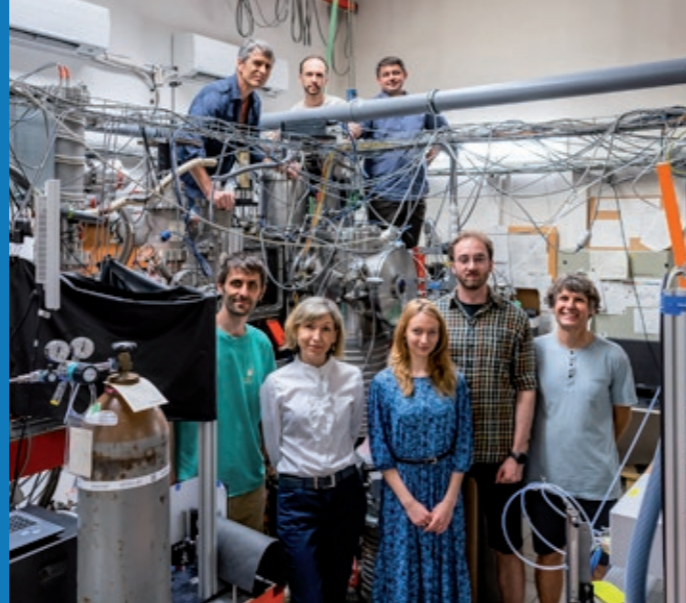
- › vývoj nových metod fluorescenční spektroskopie, mikroskopie a elektrochemie,
- › molekulární děje přímo v lidských buňkách,
- › přenos náboje přes modelová rozhraní,
- › přenos elektronu v proteinech,
- › manipulaci světla pomocí nanočástic.

Oddělení se účastní mnoha výzkumných projektů na národní i mezinárodní úrovni, např. projektu ONEM, který vyvíjí inovativní kombinaci optické a elektronové mikroskopie, s Vídeňskou a Leidenskou univerzitou jako partnerskými institucemi. Výzkum oddělení je vědeckou komunitou uznáván a vedl k získání několika ocenění (Medaile J. Heyrovského, Cena Otto Wichterleho, Akademická prémie, Lumina quaeruntur, Cena Josefa Hlávky a další).



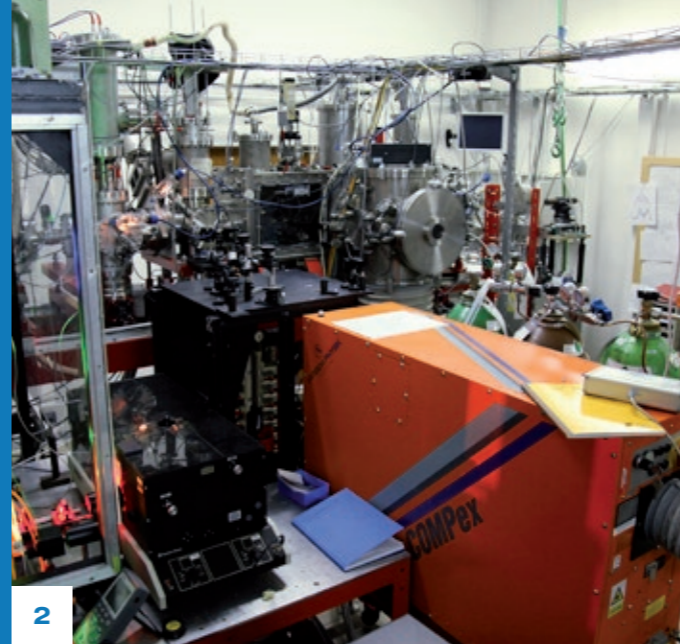
Dynamika molekul a klastrů

V našem oddělení se zabýváme především základním výzkumem. Studujeme dynamiku elementárních procesů, ke kterým dochází v molekulách, klastrech a nanočásticích při interakci s fotony a elektrony. Nicméně naše výsledky základního výzkumu jsou důležité pro nejrůznější praktické aplikace. Například klastry zkoumané v molekulových paprscích mohou představovat částice atmosférických aerosolů. Tyto aerosoly hrají klíčovou úlohu v chemii atmosféry a ovlivňují globální oteplování a úbytek ozonu i lidské zdraví v oblastech se znečištěným ovzduším. Klastry mohou napodobovat rovněž prachová zrna v mezihvězdném prostoru a jejich výzkum tak umožňuje studovat astrochemii v laboratorních experimentech.



1

1 Stavba nové paprskové aparatury na výzkum elementárních procesů v kapalinách



2

2 Lasery v laboratoři s aparaturami CLUB a AIM



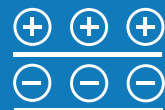
3

3 Laserová chemie na aparatuře AIM



Námi studovaný záchyt elektronů v molekulách a klastrech lze využít v nanotechnologiích i vysokonapěťových spínačích, kde rozvíjíme i spolupráce s průmyslem. Ale záchyt elektronů hraje důležitou roli i v biofyzice, např. v tak zdánlivě odtažitých oblastech, jako je radiační chemie a léčba rakoviny. Toto je jen několik příkladů, kde základní výzkum našeho oddělení přispívá k porozumění na molekulové úrovni procesům, které mají globální praktický význam.

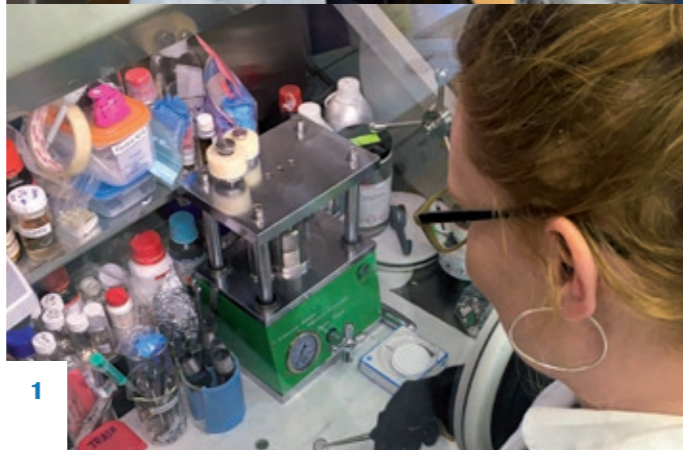
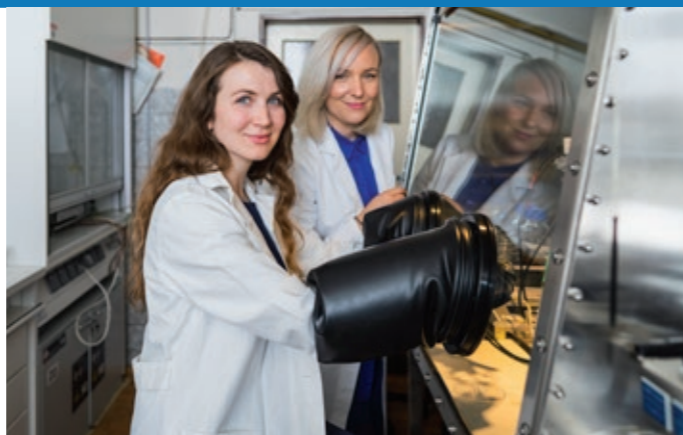
Naše experimenty se opírají o techniky IR a UV laserové spektroskopie, různé hmotnostně spektrometrické metody, iontové zobrazování, elektronové spektroskopie, DNA-origami a další. Naší specialitou v rámci ústavu jsou vlastní „v-laboratoři-postavené“ experimentální přístroje, které neustále modifikujeme, zdokonalujeme a vyvíjíme nové experimentální metody.



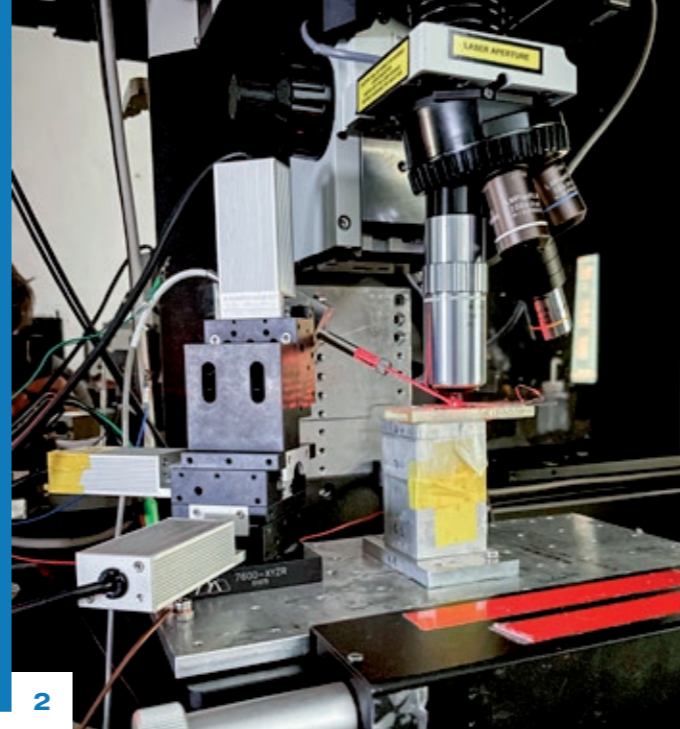
Elektrochemické materiály

Oddělení se zaměřuje na přípravu a charakterizaci elektrochemicky aktivních materiálů se zvláštním zřetelem na nanomateriály založené na elementárním uhlíku, polovodivých oxidech a anorganických 2D krystalech. Mezi hlavní směry našeho výzkumu patří zejména vývoj nových elektrodových materiálů a elektrolytů pro dobíjecí baterie typu Li-ion, Na-ion, Li-síra nebo jiných, založených na iontech přechodných kovů. Dále vyvíjíme nové materiály pro barvivo sensibilizované a perovskitové solární články, které mohou být v blízké budoucnosti využity například pro všudypřítomné průhledné panely a výrazně tak přispět k energetické bilanci naší společnosti.

Pro přípravu fotoelektrod pro aplikace v energetice a životním prostředí využíváme pokročilé metody umožňující kontrolovanou depozici tenkých vrstev o tloušťkách pod



1



2



3

1 Vývoj nových materiálů pro dobíjecí baterie

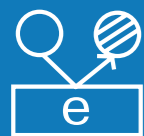
2 Pokročilý výzkum procesů ukládání a konverze energie

3 Testování aktivity nových fotokatalyzátorů pro dekontaminaci vody



1 nanometr i jejich kompletní charakterizaci od struktury až po účinnost přeměny sluneční energie na elektrickou. Naším cílem je také vývoj ekologicky příznivých aplikací pro zlepšení kvality zamořené vody u nás i v rozvojových zemích, pro úpravu vod v čistírnách apod. Pro tyto účely studujeme fotokatalyzátory, většinou oxidy kovů, které jsou po aktivaci světlem schopné rozkládat i těžko odbouratelné organické polutanty až na CO₂ a minerální kyseliny.

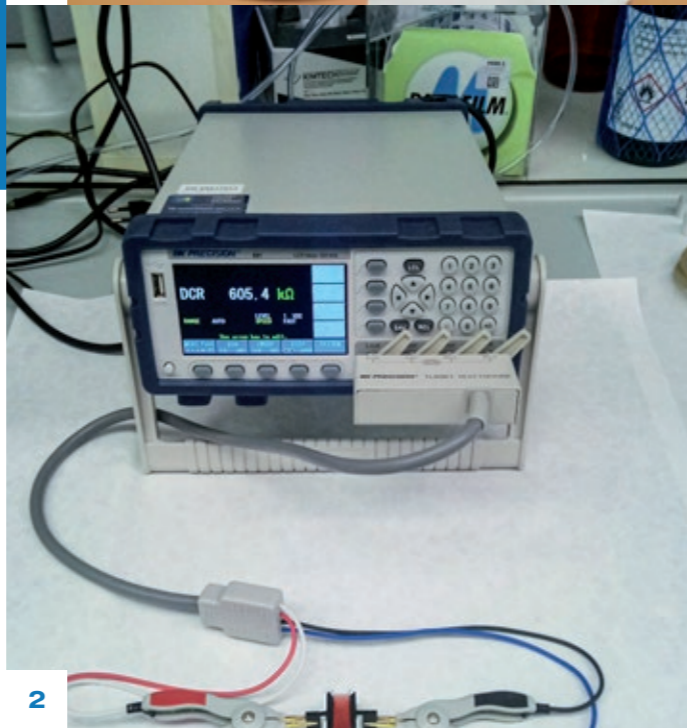
Pomocí nejmodernějších spektroskopických a mikroskopických technik, které zároveň v našem oddělení vyvíjíme a zdokonalujeme, zkoumáme i základní fyzikálně chemické procesy v plynových nanobublinách na rozhraních pevné a kapalné fáze, v jaderném reaktoru na povrchu povlakových trubek, či v dvourozměrných materiálech. Mezi naše partnery v průmyslové i výzkumné sféře patří například firma HE3DA zabývající se vývojem baterií pro stacionární úložiště energie, či špičková pracoviště EPF-Lausanne ve Švýcarsku nebo Univerzita v Manchesteru ve Velké Británii, kde úzce spolupracujeme mimo jiné i s nositelem Nobelovy cenu za fyziku Prof. K. Novoselovem.



Elektrochemie v nanoměřítku

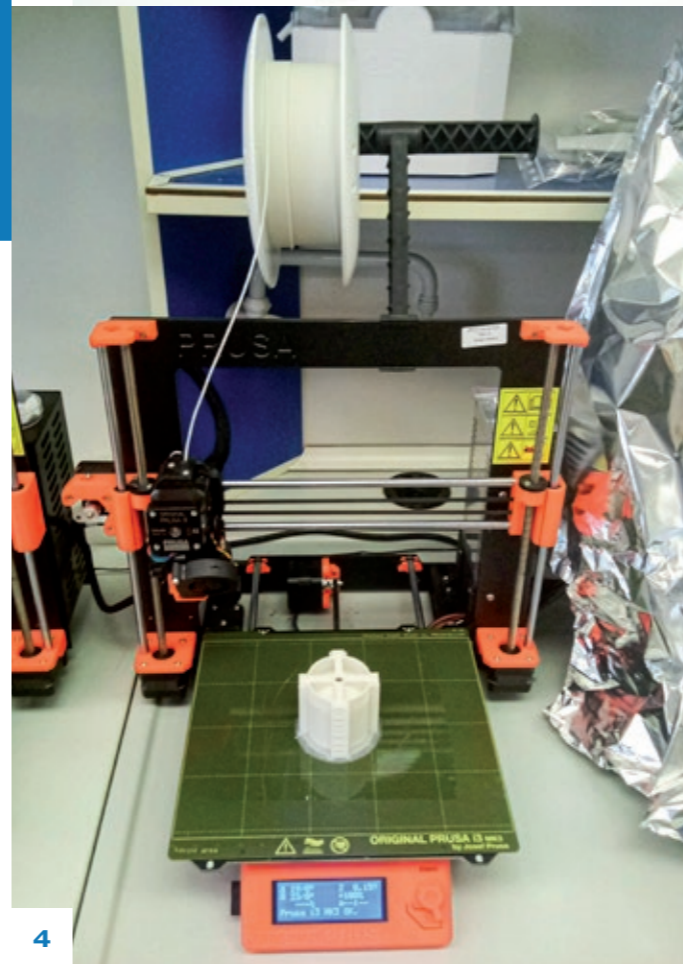
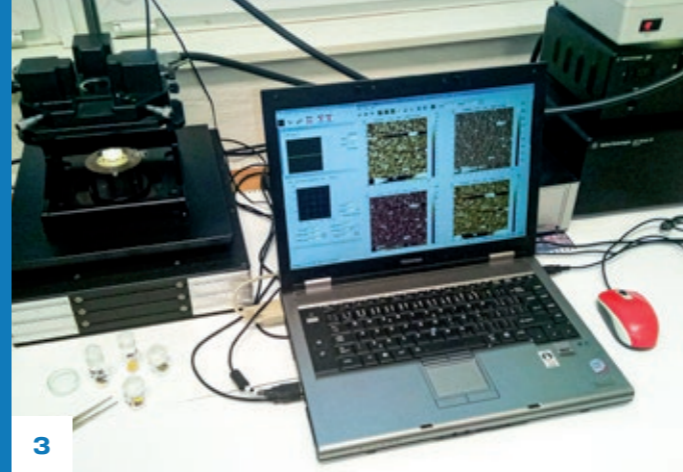
Oddělení elektrochemie v nanoměřítku se zaměřuje na výzkum elektroaktivních molekulárních systémů z pohledu nanoměřítku. Naším cílem je porozumět procesům přenosu náboje a souvisejícím jevům na molekulární úrovni. Systémy, které studujeme, byly navrženy pro různé aplikace včetně molekulární elektroniky, přeměny a skladování energie, vývoje elektrochemických senzorů pro pesticidy, těžké kovy a atmosférické polutanty a také katalyzátorů pro odstraňování těchto látek ze životního prostředí.

Dále zkoumáme vztahy mezi strukturou, vlastnostmi a reaktivitou a reakční mechanismy u biologicky významných látek, včetně hormonů, antioxidantů a léčiv. Členové oddělení se dále podílejí na zdokonalování elektrochemické instrumentace, včetně impedančních a pulzních technik, in-situ spektroelektrochemie, zobrazování povrchů a reakčních



1 Elektrochemická průtočná jednotka pro analýzu organických polutantů

2 Elektrochemická impedanční spektroskopie pro průmyslově významné analýzy



3

4

3 Mikroskop se skenovací sondou pro měření vodivosti jednotlivých molekul

4 Výroba elektrochemických senzorů pomocí 3D tisku



rozhraní v nanoměřítku a měření vodivosti a termosily v jednotlivých molekulách. Dále zkoumáme možnosti 3D tisku při výrobě mikrofluidních elektrochemických a katalytických aparatur.

Naše výsledky jsou pravidelně publikovány ve špičkových časopisech v oblasti elektrochemie, fyzikální chemie, analytické chemie a životního prostředí a jsou oceňovány mezinárodní komunitou. Náš výzkum je podporován grantovými projekty, včetně těch zaměřených na transport náboje v molekulárních elektronických součástkách, elektrokatalytickou redukcí oxidu uhličitého nebo vývoj elektrochemických (bio)senzorů na bázi nových elektrodových materiálů.

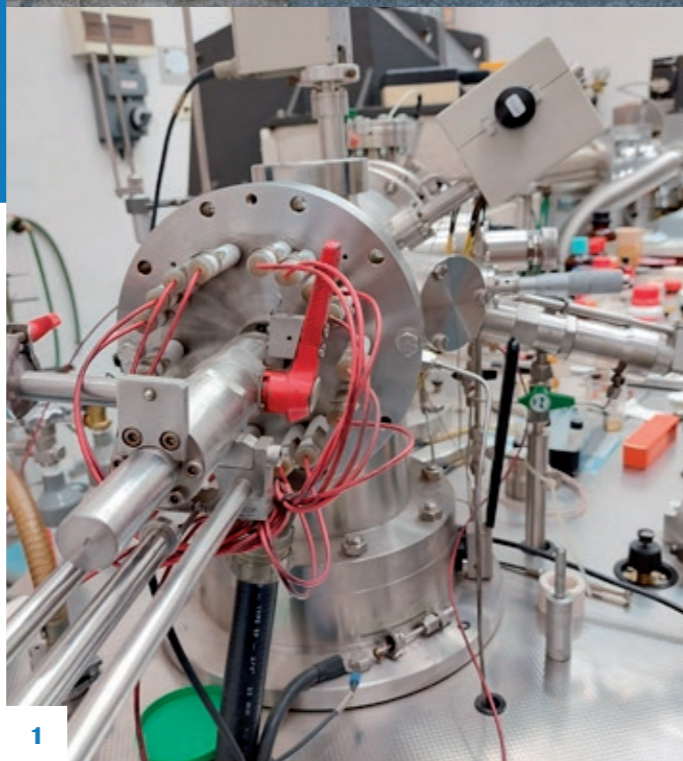
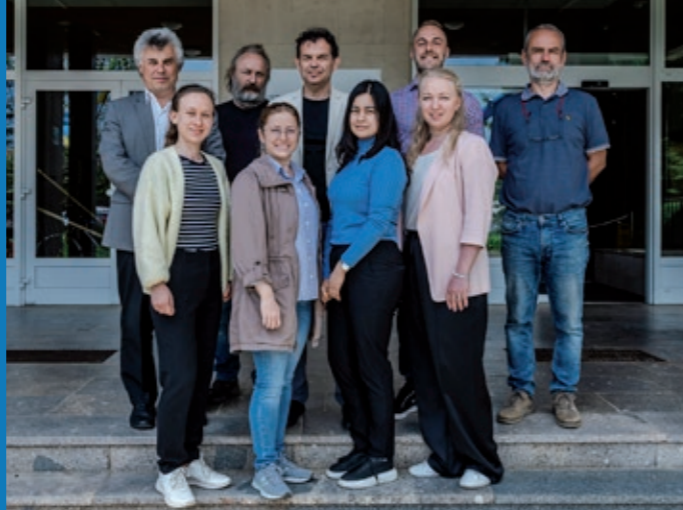


Chemie iontů v plynné fázi

Oddělení chemie iontů v plynné fázi se zabývá studiem reakcí mezi ionizovanými a neutrálními molekulami. Získané výsledky přináší zajímavé poznatky o procesech probíhajících na atomární úrovni, zároveň jsou důležité i pro poznání dějů v atmosféře a pro hmotnostní spektrometrii využitelnou pro chemické analýzy v mnoha oblastech.

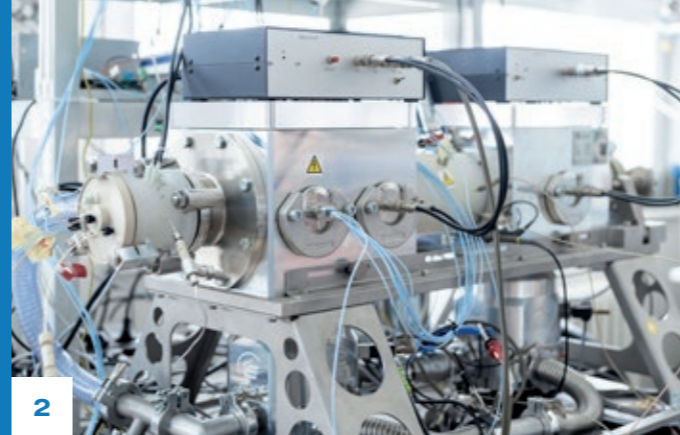
V jedné z laboratoří oddělení se věnujeme výzkumu nových metod pro citlivé analýzy stopových množství látek ve vzduchu. Hmotnostní spektrometrie se zde využívá k určování struktury molekul, pro identifikaci neznámých sloučenin a kvantifikaci známých látek v plynném vzorku.

Další oblastí vědecké aktivity oddělení je vesmírný výzkum. Navrhujeme a konstruujeme laboratorní prototypy vesmírných



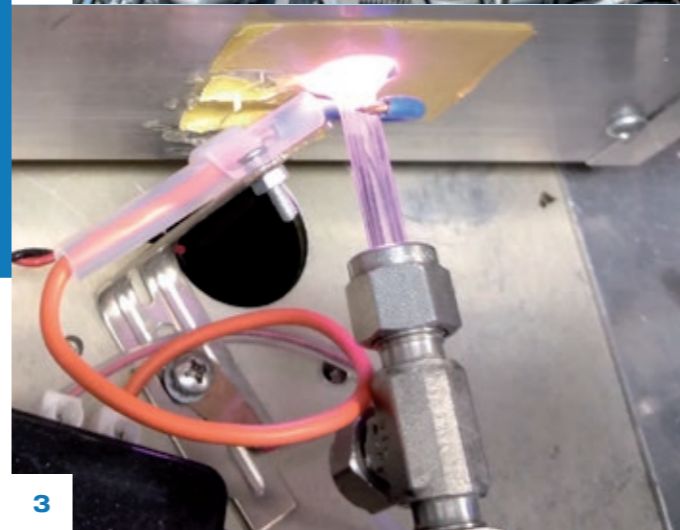
1

1 Hmotnostní spektrometr s dvojitou fokusací ZAB2-SEQ



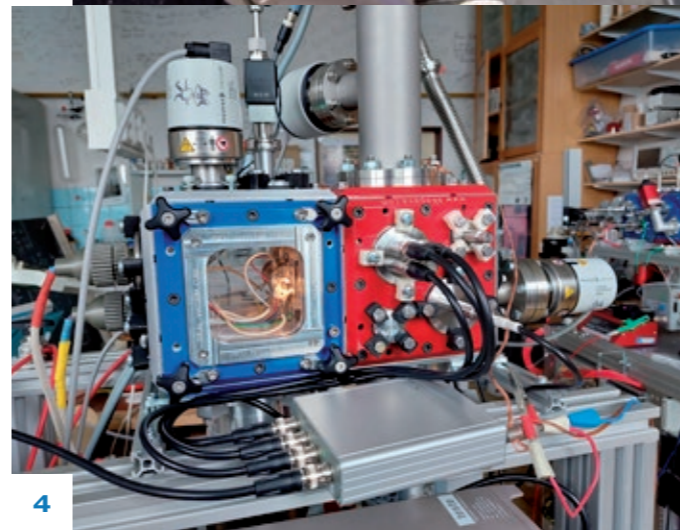
2

2 Vývoj nové metody hmotnostní spektrometrie v driftové trubici



3

3 Nízkotlaké plazma jako zdroj iontů



4

4 Laboratorní verze vesmírného přístroje HANKA pro online analýzu mikrometeoritů



hmotnostních spektrometrů s vysokým rozlišením, na jejichž základě pak budeme vyvíjet nové přístroje pro budoucí vesmírné mise. Pomocí metod hmotnostní spektrometrie také experimentálně zkoumáme chemické reakce, které probíhají v ionosférách planet a měsíců sluneční soustavy. Interakce rychlých nabitých částic s neutrálními molekulami studujeme pomocí speciálně upraveného sektorového hmotnostního spektrometru.

Výsledky výzkumu nacházejí uplatnění v medicíně, biologii, kriminalistice či potravinářství. Oddělení je také součástí mezinárodních vědeckých týmů připravujících budoucí vesmírné mise zaměřené na zkoumání sluneční soustavy a případného využití jejího nerostného bohatství příštími generacemi.



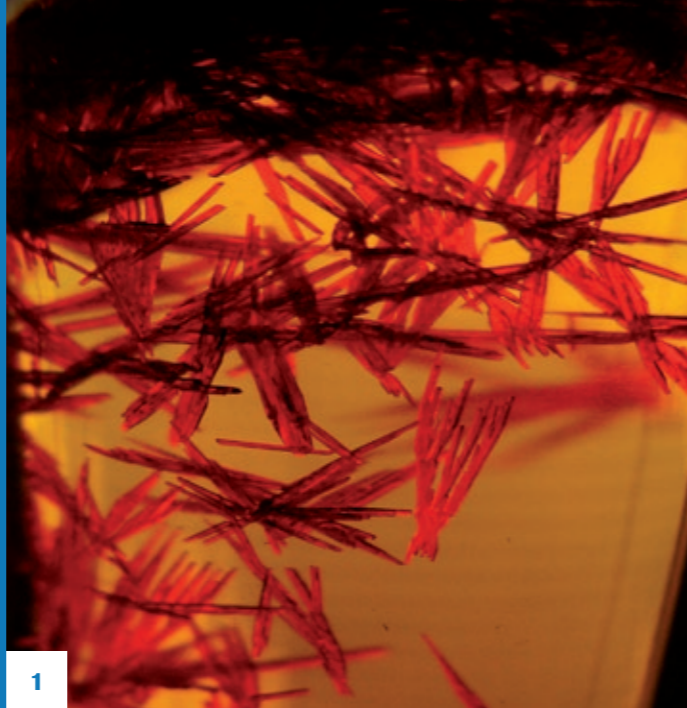
Molekulární elektrochemie a katalýza

O ddělení se zaměřuje na základní výzkum v odhalování vztahů mezi strukturou, geometrií, elektronovou distribucí, redoxními vlastnostmi a reaktivitou organických, anorganických, organokovových a komplexních molekul včetně jejich syntézy.

Naším cílem je propojit výstupy základního výzkumu s návrhem a syntézou nových molekul vhodných pro nejrůznější aplikace (katalýzu, chemické transformace, chemosensory a receptory, medicínské aplikace, fotovoltaiku apod.)

Oblasti našeho zájmu:

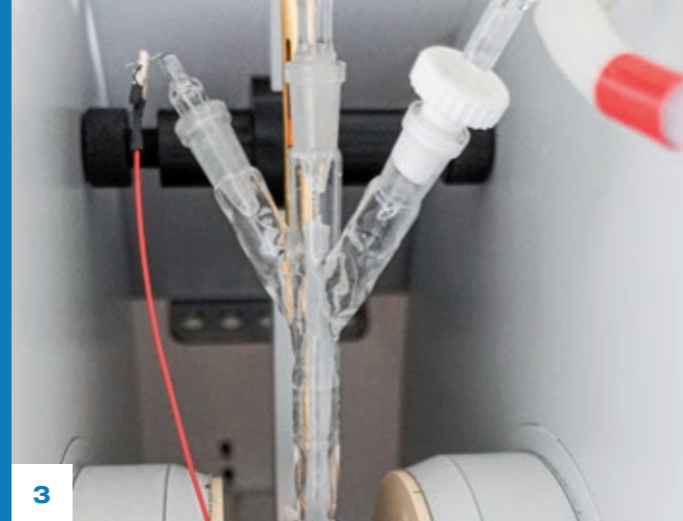
- › Design, syntéza a reaktivita nových molekul,
- › Elektrochemický výzkum redukčně-oxidačních dějů,
- › Testování katalytických procesů,
- › Studium fyzikálně-chemických vlastností molekul,
- › Kombinace fotochemie a elektrochemie – UV-vis a EPR spektroskopie,
- › Kvantově chemické výpočty pro predikci i interpretaci.



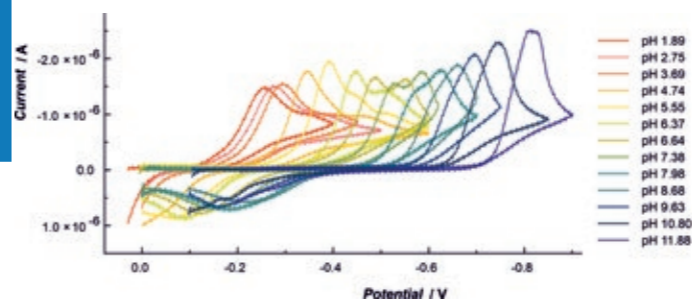
1



2



3



4



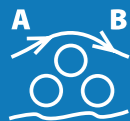
5

- 1 Krystaly organokovové sloučeniny titanu v prostředí bez přístupu kyslíku a vody
- 2 Experimentální vybavení pro elektrochemická měření na různých elektrodách
- 3 Spektro-elektrochemická cela pro simultánní měření UV-vis a EPR spekter při elektrochemickém generování radikálových částic
- 4 pH závislost měďnatého komplexu azamakrocyklu - cyklická voltametrie
- 5 Polymerizační autokláv obsahující vysrážený polyethylen po testovacím pokusu s novým katalyzátorem



Zvláštní pozornost je věnována molekulám s více redoxními centry, kde experimentálně studujeme jejich vzájemné interakce, intramolekulární přenos elektronů, distribuce hustoty elektronů a rozsah jejich delokalizace. Kromě makrocyclických sloučenin s očekávanou aplikací na poli specifických receptorů a molekul pro singlet fission (přeměna sluneční energie), jsou studovány molekuly komplexů přechodných kovů nesoucí organické ligandy pro uplatnění v homogenní katalýze a medicínských aplikacích.

Experimentální vybavení a zařízení zahrnuje syntetické laboratoře vybavené pro přípravu a manipulaci s materiály vysoce citlivými na kyslík a vodu. Pro charakterizaci sloučenin jsou k dispozici NMR, EPR, MS a UV-vis/IR spektrometry, kompletní zařízení pro elektrochemické experimenty a měření. K dispozici jsou také zařízení využívající in-situ kombinace výše uvedených metod pro studium radikálů a reakčních meziproductů.

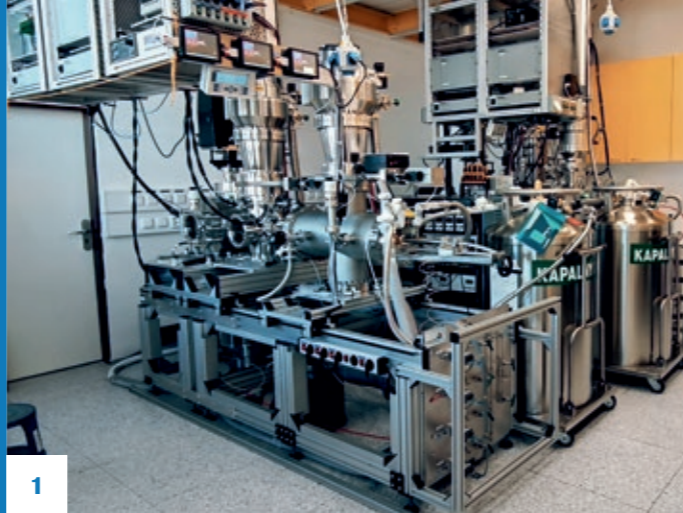


Nanokatalýza

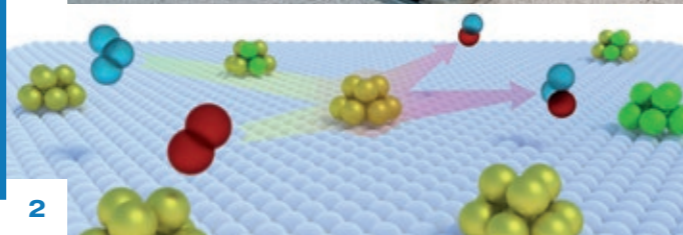
Oddělení nanokatalýzy se zabývá cíleným návrhem materiálů v subnanometrovém a nanometrovém měřítku pro základní studia širokého spektra katalytických procesů. Klíčovou charakteristikou vyvíjených materiálů je přesné chemické složení a definovaná struktura, a tyto parametry jsou ovlivňovány a řízeny na atomární úrovni.

Nanokatalyzátory jsou připravovány:

- > vakuovou depozicí kovových klastrů s přesně zvoleným počtem atomů jednoho nebo dvou kovů na technicky významných nosičích, s velikostí částic v rozsahu od jediného atomu až po jednotky nanometrů. Při depozici kovových klastrů se nejprve ve vakuu vytvoří paprsek atomových klastrů různého složení a velikosti, z nichž jsou pomocí hmotnostního spektrometru vybrány klastry o předem stanovené hmotnosti. Tyto klastry jsou pak deponovány na katalyticky zajímavé podložky. Takto deponované klastry vykazují vysokou přesnost chemického složení a jejich velikosti se dají měnit atom po atomu. Vliv atomárního složení klastrů na katalytické vlastnosti a vhodnost zvolených nosičů se zkoumají v heterogenních reakcích typu přeměny CO_2 , oxidace CO či pro vysoce



1

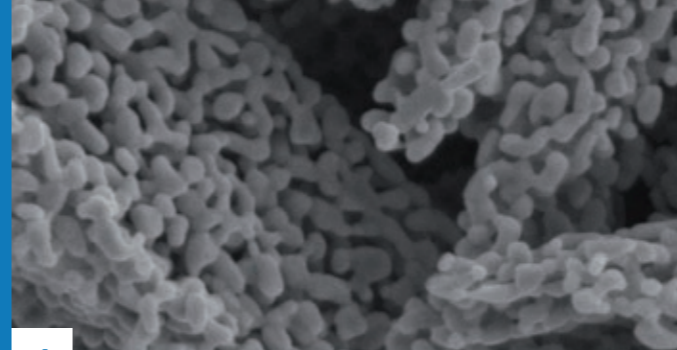


2

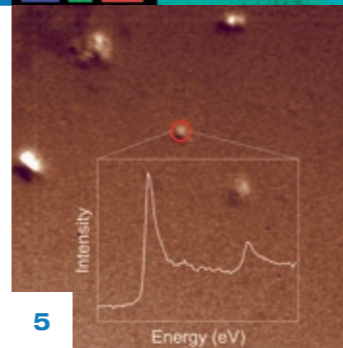
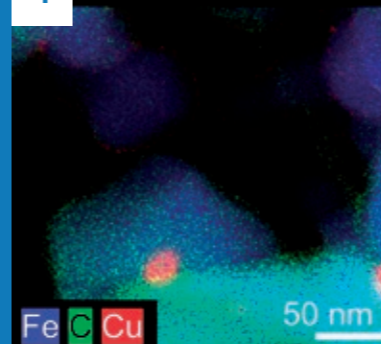


3

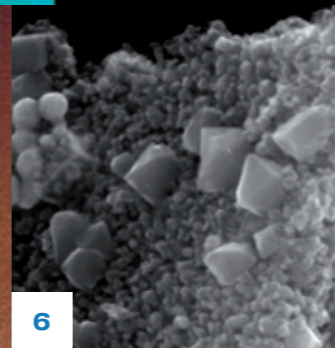
- 1 Laboratoř pro přípravu klastrů s přesně kontrolovanou velikostí a atomárně přesným složením
- 2 Schematické znázornění klastru v akci
- 3 Aparatura pro testování nanokatalyzátorů



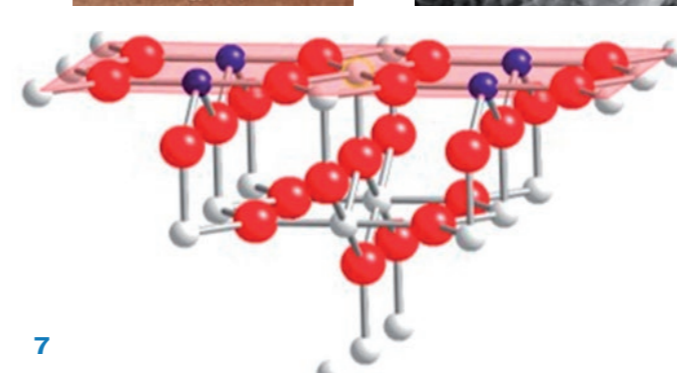
4



5



6



7

- 4 Hybridní nanostrukturovaný katalyzátor na bázi oxidu železitého s integrovanými nanočásticemi mědi při efektivní přeměně CO_2 v užitečné uhlovodíky
- 5 Absorpce synchrotronového rentgenového záření na jediné nanočástici niklu o velikosti zhruba 80 nm odhaluje chemický stav niklu při transformaci metanu
- 6 Nanokrystaly $\text{Ru}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ velikosti přibližně 50 nm
- 7 Schematické znázornění struktury nanokrystalu odvozené z rentgenových měření



selektivní oxidaci uhlovodíků. Ve spolupráci s mezinárodními partnery se studuje elektrokatalytické štěpení vody, konverze CO_2 a nebo katalyzátory v Li-O₂ bateriích.

- > chemickou přípravou hybridních katalyzátorů o velikosti jednotek až desítek nanometrů. Tyto nanokatalyzátory jsou syntetizovány pokročilými syntetickými metodami a jsou účinné například pro konverzi CO_2 a methanu (tj. skleníkových plynů) či pro selektivní přeměnu vyšších uhlovodíků.
- > chemickou přípravou nanokrystalických částic. Příprava nanokrystalických elektrokatalyzátorů je založena na teoretické predikci vhodných aktivních míst podporujících aktivitu vyvíjených materiálů v reakcích ukládajících obnovitelnou energii v alternativních palivech, jako je například vodík či paliva získaná redukcí CO_2 . Modelové nanokrystalické materiály obsahující požadovaná aktivní místa jsou syntetizovány kryogenickými, solvotermálními a srážecími postupy. Funkčnost takto připravených materiálů je pak testována za podmínek srovnatelných s podmínkami katalytických aplikací. Materiály jsou studovány pomocí rentgenového záření s cílem pochopit jejich katalytické chování a optimalizovat jejich účinnost na základě obecných vztahů mezi strukturou a reaktivitou.



Nízko-dimenzionální systémy

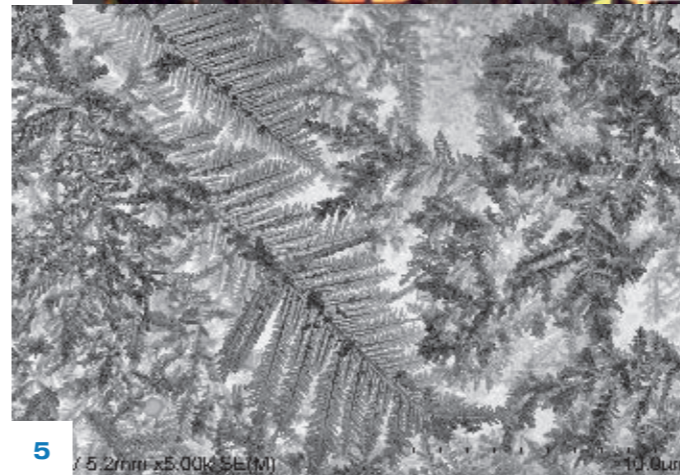
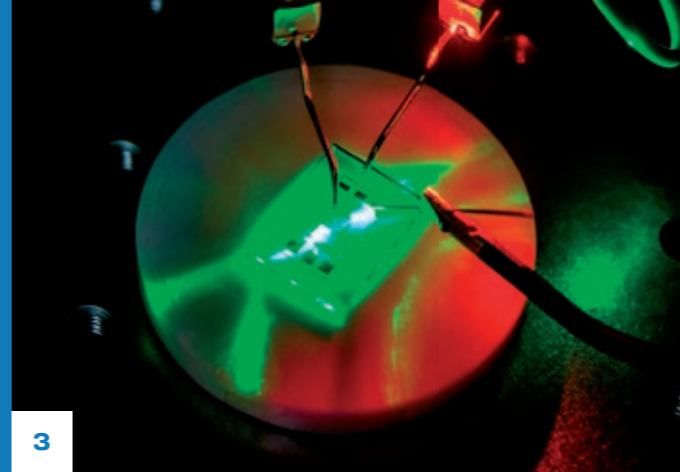
Náš výzkum je zaměřen na jedno- a dvoj-dimenzionální materiály jako je grafen, kovové chalkogenidy, uhlíkové nanotrubky a další související materiály. Vybudovali jsme rozsáhlou infrastrukturu pro přípravu a charakterizaci materiálů, která pokrývá výzkum nanomateriálů od syntézy, přes modifikaci a analýzu fyzikálních a chemických vlastností až po konstrukci součástek obsahujících tyto perspektivní materiály.

Výzkumné projekty vycházejí z vyhodnocení elementárních principů na jejichž základě lze vylepšit vlastnosti materiálů ve prospěch jejich aplikace v oblastech jako jsou senzory, tranzistory a další mikroelektronika.



1 Kontrola senzorů a elektrických cest po litografii

2 Integrace do funkčních bloků



3 Charakterizace
- Spektroskopická kontrola zařízení

4 Tranzistor:
Ukázka MOS-FET tranzistoru na bázi MoS₂

5 SEM snímek fraktálního SERS substrátu pro analýzu biologických vzorků



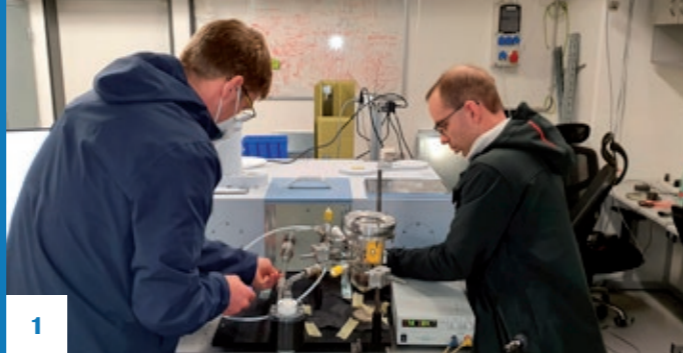
Oddělení je dále rozděleno na několik specializovaných podskupin, přičemž každá podskupina přináší základní pochopení specifické oblasti, které všechny dohromady umožňují provádět materiálový výzkum ve své celkové komplexnosti.



Spektroskopie

Oddělení spektroskopie je předním českým centrem aplikovaného a základního výzkumu spektroskopických technik. Naše badatelská činnost zahrnuje vývoj citlivých senzorů pro analýzu plynů a ovzduší, zkoumání nových high-tech materiálů využitelných ve vysoce výkonných světelných zdrojích, charakterizaci nových materiálů, generování reaktivních specií na površích a vývoj nových analytických technik v oblasti forenzních věd.

Soustředíme se i na další aktuální témata současné vědy: zabýváme se nevyjasněnými otázkami chemické evoluce Země a identifikací a kvantifikací prebiotických procesů, které by mohly vést ke vzniku života na planetách zemského typu, jako je Mars nebo dokonce vzdálené exoplanety. Zkoumáme základní procesy v plazmatu generovaném pomocí velkých laserů či procesy v plamenech.



1

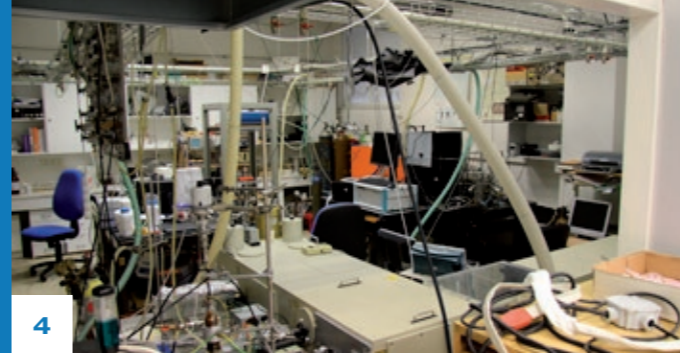


2



3

- 1 Příprava experimentu přeměny planetárních atmosfér účinky impaktu asteroidu. Bude jednou možné zjistit pomocí kosmických teleskopů, jak se vyvíjely rané planety bičované deštěm padajících hvězd?
- 2 Kosmický teleskop Ariel přinese odpovědi na řadu fascinujících otázek týkajících se exoplanet. Laboratorní experimenty na našem oddělení jsou nezbytné k pochopení pozorování, které Ariel učiní.
- 3 V laboratoři vysoce rozlišené spektroskopie zkoumáme základní charakteristiky molekul a atomů. Bez těchto dat není možné studovat mechanismy chemických reakcí, nové materiály, rozklíčovav složení padajících hvězd či vzdálených exoplanet.



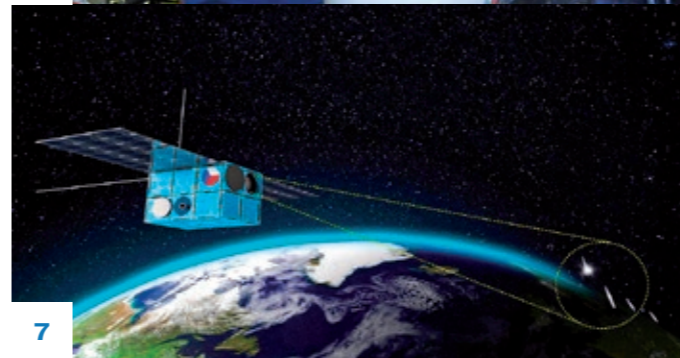
4



5



6



7

4 Vysoce rozlišený spektrometr je speciálně upraven pro detekci nestabilních chemických látek v plazmatu. Jeho měření dovolují sledovat děje trvající jen milióntiny vteřiny v elektrických výbojích či laserových jiskrách. Technické řešení v naší laboratoři je světově unikátní. Po rozebrání stejného přístroje na Univerzitě v Okajamě je nyní náš kontinuálně skenující Fourierský interferometr s časovým rozlišením jediný svého druhu na světě.

5 Plazma meteorů, padajících hvězd, studujeme pomocí simulací jedním z největších laserů na světě. V interakční komoře je připravován k zásahu laserem vzorek vzácného Pallasitu, železného meteoritu se zrnky olivínu pocházejícího z nitra dávno zaniklého asteroidu.

6 Nestabilní radikály, ionty a atomy detekujeme pomocí časově rozlišené spektroskopie pomocí elektrických a laserových jisker v plynných médiích.

7 Výzkum v naší laboratoři motivoval přípravu mise ryze českého CubeSatu SLAVIA.



Naše oddělení úzce spolupracuje s předními světově uznávanými výzkumnými institucemi (např. Sorbonnská či Cambridgeská univerzita) i s významnými domácími univerzitami a vědeckými ústavy. Našimi partnery jsou také soukromé subjekty s významným podílem výzkumu a inovací (např. Crytur Turnov, Optické dílny AV Toptec, SAB Aerospace) i vládní instituce, např. Ministerstvo vnitra či Policejní prezidium ČR.

Vědci a studenti Oddělení spektroskopie obdrželi celou řadu akademických cen (např. cena Wernera von Siemense, Česká hlavička, Cena Učené společnosti, Wichterlova prémie). V současné době naše oddělení koordinuje zapojení do významných kosmických misí, jako je vesmírný teleskop Ariel, sonda EnVision k Venuši či český CubeSat Slavia. Oddělení pracuje také na vývoji technických zařízení pro tyto mise.



Struktura a dynamika v katalýze



1

Katalýza představuje základ současné chemické výroby a podílí se asi 20 % na tvorbě světového hrubého domácího produktu. Zároveň je využívána k eliminaci škodlivin z chemické výroby i z dalších zdrojů, např. výfukových plynů. Nezbytná transformace chemické výroby na ekologicky udržitelnou, výroba nových materiálů a využití nových surovin vyžadují nové katalyzátory a katalytické procesy.

Pro přípravu nových, vysoce selektivních a aktivních katalyzátorů od laboratorního po poloprovozní měřítko využíváme aktivní centra stabilizovaná v mikroporézních 3D alumosilikátových nebo uhlíkových maticích. Prvním krokem je syntéza maticí s definovanými vlastnostmi. Následuje vytváření aktivních center definovaných na atomární úrovni, která byla navržena pomocí kvantově chemických



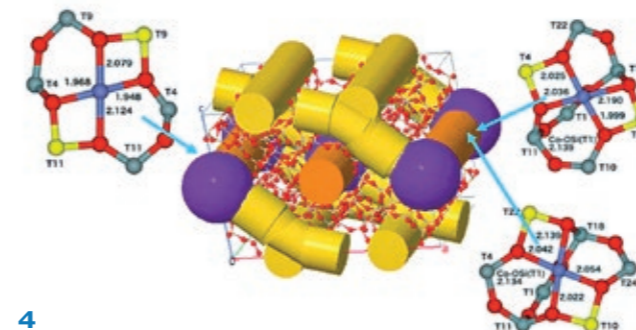
2

výpočtů. Struktura aktivních center je ověřena pomocí řady technik zahrnujících skenovací a transmisní elektronovou mikroskopii, teplotně programované redukční a reakční techniky a multispektroskopickou analýzu, kombinující multinukleární NMR spektroskopii pevné fáze, difuzně-reflexní UV-Vis-NIR spektroskopii, laserově indukovanou kinetickou emisní spektroskopii, Mössbauerovskou spektroskopii



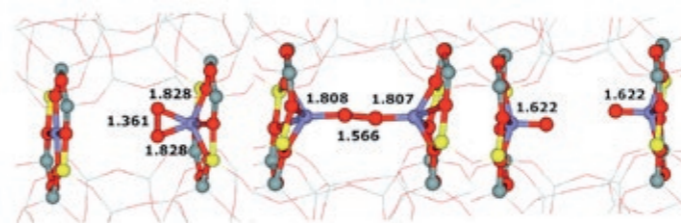
3

- 1 Syntéza zeolitických katalyzátorů
- 2 Mgr. Jiří Dědeček, CSc., DSc. převzal v roce 2020 ocenění Česká hlava
- 3 Analýza aktivních center pomocí operando FTIR spektroskopie
- 4 Lokalizace dvojmocných kationtů v zeolitu TNU-9
- 5 Mechanismus disociace kyslíku na binukleárním Fe(II) centru



4

a infračervenou spektroskopií. Řada těchto technik je využita ve své in-situ verzi i ke studiu reaktivity připravených katalyzátorů, opět na atomární úrovni. Finále vývoje katalyzátoru pak představuje testování jeho aktivity pomocí reakčních kinetických testů, kdy vzniklé reakční produkty sledujeme pomocí plynové chromatografie a hmotnostní spektroskopie.



5

Pozornost je zaměřena jak na využití kyselé katalyzovaných reakcí pro transformace uhlovodíků pro efektivnější petrochemickou výrobu, tak na redoxní procesy využívající aktivní centra na bázi přechodových kovů pro eliminaci NO/NO_x, skleníkového N₂O, a pro selektivní oxidaci metanu na metanol. Za výzkum této reakce jsme byli v roce 2020 oceněni cenou Česká hlava.



Teoretická chemie

Vývoj a aplikace metod teoretické chemie založených na principech kvantové mechaniky má v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i. více než šedesátiletou tradici. V současnosti lze výzkum na oddělení teoretické chemie zařadit do několika základních směrů.

Silně korelované systémy

Molekulární systémy se silnou elektronovou korelací tvoří jednu z výzev současné kvantové chemie. Proto se zabýváme vývojem a aplikací moderních metod pro přesnější popis takových systémů založených na metodách multireferenčních a externě korigovaných coupled clusters (CC), density matrix renormalization group (DMRG) a post-DMRG metodách.



1



2

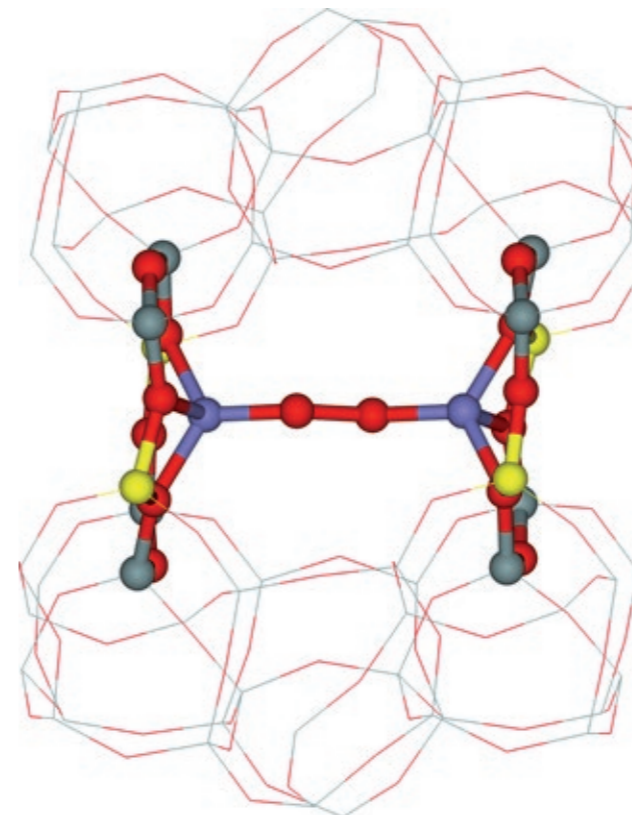


3

1 Analýza molekulární rezonance metodou RAC

2 V naší laboratoři najdete výpočetní klastry

3 Přednášíme na českých univerzitách



4

Struktury pevných povrchů, klastrů, zeolitů a nanostruktur

Zeolity jsou hliníkokřemičité materiály s mikroporézní strukturou. Společně s povrchem klastrů poskytují vnější a vnitřní plochu pro katalýzu chemických reakcí. Naše pracoviště se zabývá výzkumem struktury aktivních center těchto systémů a bylo součástí týmu, který v roce 2020 získal cenu Česká hlava.

Srážky elektronů a molekul

Studium interakce elektronů s molekulami je nutné pro pochopení procesů v horních vrstvách planetárních atmosfér, pro vývoj technologií v polovodičovém průmyslu, pro výzkum a léčbu rakoviny v medicíně. Náš výzkum je zaměřen na vývoj metod pro modelování elastických i neelastických srážek.

4 Optimalizovaná struktura přechodného stavu tvořeného vzdálenými dvojjadernými Fe(II) místy štěpicími dikyslík



Neadiabatická molekulová dynamika pro fotochemii

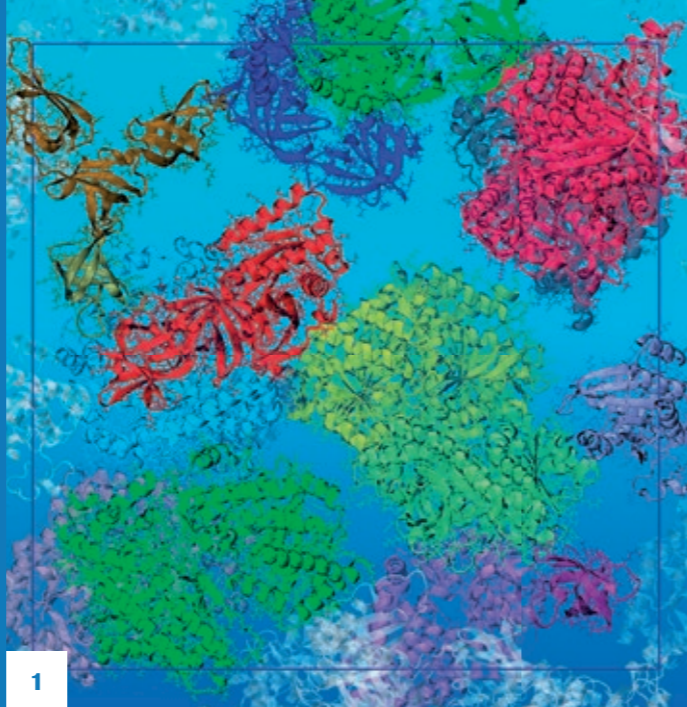
Modelování fotochemických procesů vyžaduje přístupy kombinující dynamiku atomových jader s přechody mezi elektronickými stavy molekuly. Proto vyvíjíme a aplikujeme metody molekulové dynamiky se zahrnutím neadiabatických a spinorbitálních vazeb, v poslední době též s podporou technik strojového učení.

Kvantové počítače

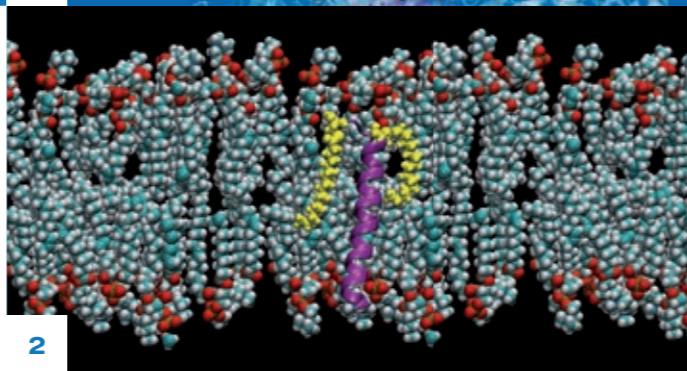
Algoritmy kvantového počítání jsou založeny na základních fenoménech kvantové mechaniky. Pro mnoho problémů poskytují zcela zásadní a nový přístup k jejich řešení. U nás se zabýváme kvantovými algoritmy pro problémy kvantové chemie, jako je např. hledání energie základního stavu molekul.



Výpočetní chemie



1



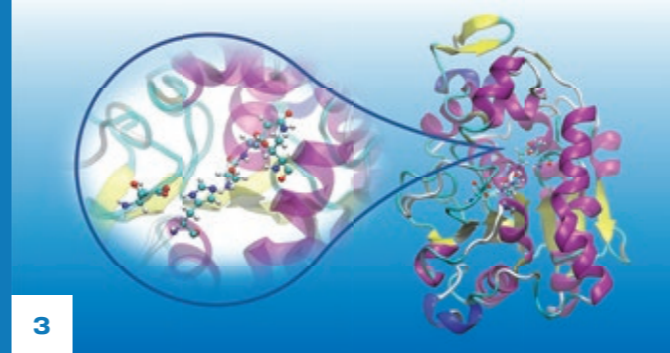
2

1 Atomistický popis buněčné cytoplasmy

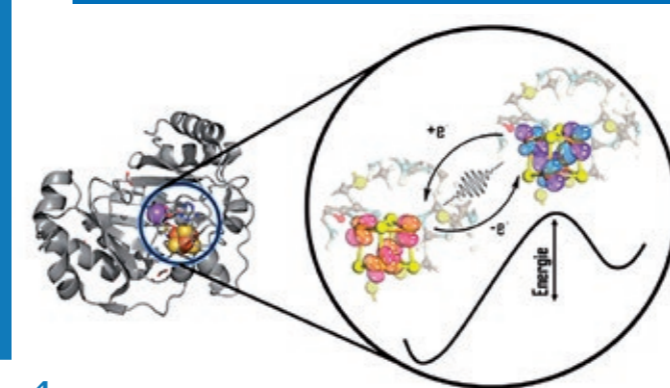
2 Peptid interagující s buněčnou membránou

Vnaší práci jsme inspirováni přírodou, přírodními jevy, přeměnami, které neustále probíhají v nás a okolo nás. Podobně jako jiné chemické odborníky a odbornice nás zajímá, jak takové procesy probíhají, co je řídí a jak takové přeměny napodobit, zefektivnit pro naše účely, nebo naopak omezit, neprobíhají-li správně např. v důsledku nemoci. S tím je spojený návrh nových látek s vhodnými vlastnostmi.

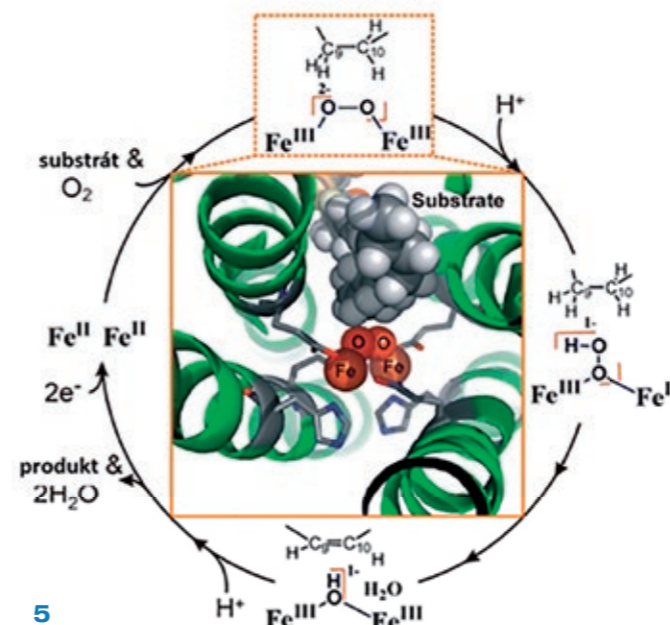
Namísto chemických baněk a aparatur jsou našimi pracovními nástroji počítače a zákony kvantové, molekulové a statistické mechaniky i molekulové dynamiky, které používáme při rozboru komplexních (bio)chemických systémů a jejich funkcí. A to na rozličných strukturních úrovních – od mikrosvěta po elektrony. V tomto smyslu se snažíme porozumět, jak se chovají zdravé a poškozené lipidové membrány na povrchu buňky, jak fungují v buněčném (vodném) i nevodném prostředí



3



4



5

3 Zoom do aktivního místa enzymu

4 Změna elektronové struktury a energie aktivního místa enzymu při jeho redukcí či oxidaci

5 Aktivní místo enzymu s ionty kovů a mechanismus katalytického cyklu



enzymy, čím a jak lze regulovat dynamiku a stabilitu těchto enzymů. V enzymech nás dále obzvláště zajímají jejich reaktivní centra, elektronová struktura, co tuto elektronovou strukturu ovlivňuje a jaký je její vliv na vysokou reaktivitu a selektivitu, tak typickou pro enzymovou katalýzu. Z teoretických modelů, které studujeme a které konfrontujeme s experimentálními fakty, vyvozujeme důležité vztahy mezi strukturou a funkcí a zobecňujeme fyzikálně chemické principy, kterými se námi studované systémy řídí. Tyto principy se snažíme aplikovat na design látek, které mají potenciál léčit nebo efektivně katalyzovat reakce společenského významu.

Centrum pro inovace v oboru nanomateriálů a nanotechnologií

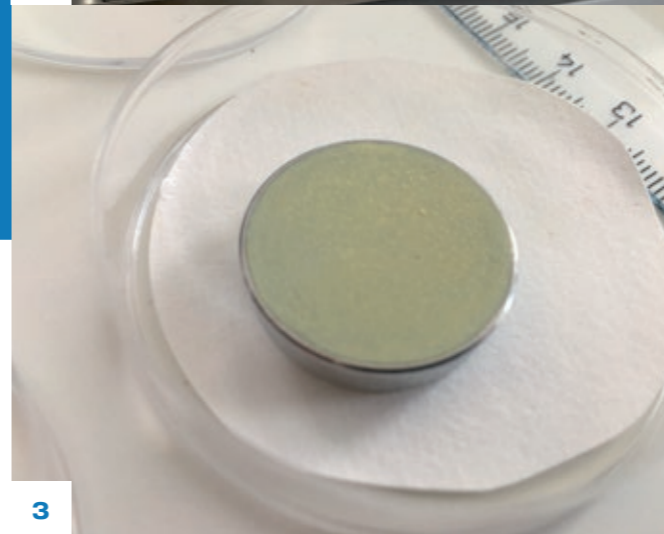
Výzkum Centra pro inovace v oboru nanomateriálů a nanotechnologií (Nanocentrum) je zaměřen na vývoj nových metod pro ochranu životního prostředí a komplexní konzervaci artefaktů hmotného kulturního dědictví. Jedinečnost našeho přístupu spočívá ve velmi úzkém propojení pokročilého akademického výzkumu a jeho aplikace v nových technologiích. Zaměření Nanocentra je založeno na rozsáhlých odborných znalostech v oblasti nanotechnologií, fotochemických a fotokatalytických procesů. Vědecký tým zahrnuje odborníky z různých vědeckých disciplín, což umožňuje komplexní řešení relevantních problémů s významným celospolečenským dopadem.



1



2



3



4

- 1 Aplikace čistících gelů na fragmentu středověké deskové malby z Moravské galerie, Brno
- 2 Fotokatalytická aparatura
- 3 Vzorek kompozitního fotokatalyzátoru
- 4 Studium mechanických vlastností materiálů v mikro- a nanoměřítku pomocí nanoindentoru



Výzkum Nanocentra je zaměřen na:

Čištění vzduchu: komplexní fotokatalytické technologie pro odstraňování NO_x , O_3 , těkavých organických látek, prachových částic atd.

Čištění vody: fotokatalytické technologie pro odstraňování nových typů kontaminantů vody, jako jsou antibiotika, drogy nebo pesticidy.

Ochrana kulturního dědictví: postupy a materiály pro komplexní konzervaci a preventivní ochranu historických památek na základě výzkumu v oblasti materiálových věd a nanotechnologií a zejména jejich využití pro restaurování historických artefaktů.

Scale-up: řešení technologických aspektů nezbytných pro využití vyvíjených technologií ve výrobě, vyhodnocení jejich efektivity a snadnosti použití.

Vývoj metodiky: přenos dat z laboratoře podmínek do podmínek reálného světa. Hodnocení vyvinutých technologií: jejich celkový dopad na životní prostředí, zahrnující potenciální toxicitu samotných funkčních nanomateriálů a produktů fotokatalytického odstraňování polutantů ze vzduchu i vody.

Významná ocenění: 2. místo Transfera Technology Day 2021

Centrum vzdělávání

Ústav je akademickým pracovištěm, které se vzdělávání mladých zájemců a zájemkyň o přírodovědné obory z řad studujících vysokých, středních a základních škol věnuje dlouhodobě a systematicky v průběhu celého roku. Počet vzdělávacích programů, kterými jsou věda a výzkum představovány cílovým skupinám, přesahuje ročně stovku.

Studující vysokých škol se zapojují do naší vědecké a výzkumné činnosti v rámci svých bakalářských a diplomových prací. Ve svém zapojení do vědy pak často pokračují i jako doktorandi a doktorandky a stávají se tak spolupracovníky vědců a vědkyň při řešení jejich projektů. Cílové skupině dětí ze základních a středních škol je věnována pestrá směsice programů zahrnující workshopy či praktická měření v laboratořích, přednášky, exkurze, kroužky a stáže ve

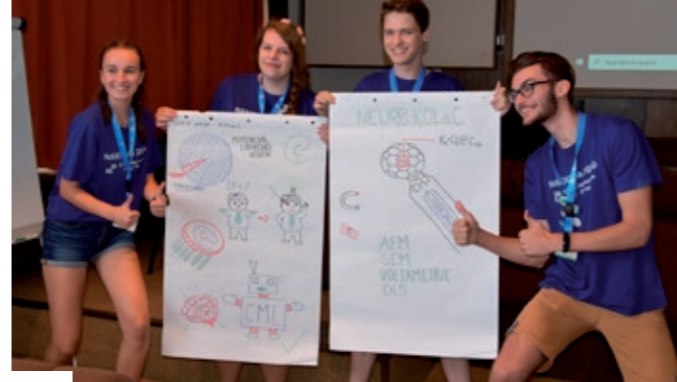


1

2

1 Chemické divadlo vzbuzuje úžas a nadšení pro chemii

2 Odkaz Jaroslava Heyrovského a polarografii připomínáme od roku 2009 široké veřejnosti putovní výstavou Příběh kapky



3

4

5

3 Zaujmout žáka pro chemii jde jedině přes experimentování, na kterém jsou založeny naše vzdělávací programy pro všechny věkové skupiny žáků

4 Chemický workshop, kde teorii ověřujeme experimentem

5 Na letní škole studenti získají nové znalosti i nové přátele



vědeckých týmech, letní školy a víkendové chemické kurzy. Mezi další klíčové akce popularizace vědy a výzkumu zaměřené na širokou veřejnost patří pestrý program zářijové mezinárodní Noci vědců, expozice na Veletrhu vědy či akce v rámci festivalu Týden AV ČR. Naše vědce a vědkyně mohou zájemci potkat v programu vědeckých kaváren, na našich putovních výstavách (např. Příběh kapky nebo Dotkni se (exo)planet) či v médiích.

Každoročně se do realizace pestré směsice programů zapojuje až padesátka vědců a vědkyň, odborných pracujících a studujících. Koordinaci programů zajišťuje Útvar pro vzdělání. Dlouhodobě tak spolupracujeme s více než 100 školami po celé České republice. Akce jsou z velké části finančně podpořeny dotacemi z projektů, např. MŠMT.



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



Rozvoj kapacit ÚFCH JH, v. v. i. pro výzkum a vývoj II - CZ.02.2.69/0.0/0.0/18_054/0014591

Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8, Česká republika
tel: +420 266 05 3286, +420 266 05 2011
e-mail: director@jh-inst.cas.cz, www.jh-inst.cas.cz