

## Nová vlna špičkových vědců ze světa i tuzemska míří do RCPTM

V říjnu uplyne pět let od otevření nové budovy RCPTM. Za tu dobu se v ní vystřídaly desítky vědců z 20 zemí světa. Další vlnu internacionalizace a personálního posílení jednotlivých pracovních skupin zahájilo RCPTM letos. V tomto čísle našeho čtvrtletníku představíme právě vědecké aktivity nových akvizic Centra prostřednictvím jejich publikací pod hlavičkou RCPTM. Dočtete se tak o výzkumu alternativních zdrojů zelené energie pomocí 1D nanostruktur, který vede Patrik Schmukli z Německa (Kment S. et al. *Chem. Soc. Rev.* **46**, 3716-3769, 2017), nebo o možnostech aplikací plasmonických materiálů (Naldoni A. et al. *Science* **356**, 908-909, 2017), jimiž se zabývá Alberto Naldoni z Itálie – čerstvá posila fotoelektrochemické skupiny. Přiblížíme také spolupráci s kolegy z Technické univerzity v Mnichově (Jayaramulu K. et al. *Adv. Funct. Mater. In Press*, 2017), odkud k nám přichází Jaya Ramulu Kolleboyina věnující se výzkumu využití kovových organických sítí pro pokročilé energetické a environmentální aplikace. První práci (Onoda J. et al. *Nat. Commun.* **8**, 15155, 2017) pod společnou hlavičkou RCPTM a Fyzikálního ústavu Akademie věd ČR představí Pavel Jelínek, se kterým si Martina Šaradinová povídala o unikátních možnostech pohledu do světa molekul metodou skenovací

tunelové mikroskopie (STM) i zahraničních posilách v budované mikroskopické laboratoři v Olomouci. Představíme nové členy Učené společnosti České republiky (Michal Otyepka – vedoucí skupiny uhlíkových nanostruktur) a Královské chemické společnosti (Manoj B. Gawande – vedoucí skupiny nanokatalýzy), ale i dalšího řečníka, který proslaví přednáškou v cyklu Rudolf Zahradník Lecture Series. Bude jím Paolo Fornasiero z Univerzity v Terstu, editor časopisu ACS Catalysis, přední světový vědec v oblasti vývoje nanomateriálů využitelných v energetice a heterogenní katalýze, autor řady publikací v časopisech Science a Nature family. Nově přinášíme rubriku Naši absolventi, kde o slastech i strastech vědecké profese vypráví čerstvá absolventka postgraduálního studia Kateřina Holá, spoluautorka prací například v časopisech Nano Today (2014), Chemical Reviews (2016), Advanced Materials (2015) nebo Nature Communications (2016, 2017). V rubrice Naše granty se tentokrát zaměříme na aplikované a publikační výsledky Centra kompetence TAČR Nanobiowat a spolupráci s tuzemskými i zahraničními partnery v oblasti čištění vod a půd pomocí nanotechnologií.

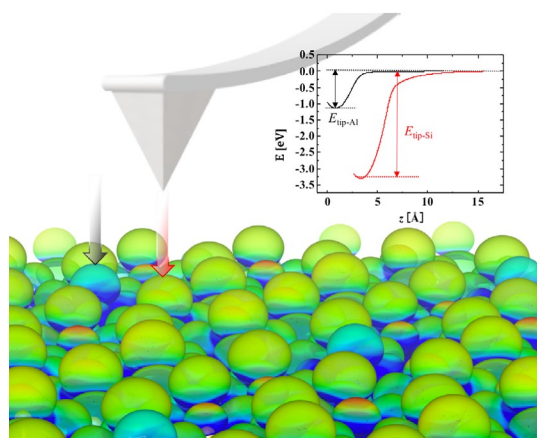
Příjemné čtení a pohodové léto přeje

Radek Zbořil  
generální ředitel

# Vědecké výsledky

## Nová metoda mění pohled na chemické vlastnosti prvků

Elektronegativitu prvků, která mimo jiné určuje schopnost daného atomu reagovat s okolím a vytvářet chemické vazby, dokázali donedávna vědci určit pouze pomocí technik pracujících s velkým souborem atomů. Změnu přinesl výzkum Pavla Jelínka a jeho kolegů z Fyzikálního ústavu Akademie věd ČR a Tokijské univerzity. Díky jejich nové metodě lze pomocí mikroskopie atomárních sil nejen stanovit elektronegativitu daného atomu na povrchu pevné látky, ale určit i její závislost na chemickém okolí měřeného atomu. Autorský tým navázal na svoji dřívější práci (Sugimoto Y. et al. *Nature* 446, 64–67, 2007), nová metoda ale překonává omezení původního postupu chemické identifikace atomů a umožňuje určit totožnost chemických prvků s různou elektronegativitou. Vědci prokázali, že dosavadní údaje o elektronegativitě prvků platí pouze v případě izolovaných atomů. Možnost stanovit změnu elektronegativity na základě chemického okolí atomu přináší nový pohled nejen na tuto vlastnost, ale také na s ní související podstatu vazeb v chemických sloučeninách a na samotnou chemickou reaktivitu. Analýzou dat badatelé prokázali charakteristickou lineární závislost mezi vazebnými energiemi povrchových atomů různého chemického původu. Experimentálně tak ověřili platnost rovnice nositele Nobelovy ceny Linuse Paulinga pro polární kovalentní vazbu.



Onoda J., Ondráček M., Jelínek P., Sugimoto Y.: Elektronegativity determination of individual surface atoms by atomic force microscopy, *Nature Communications* 2017, 8, 15155. IF = 12.124

## Cestu za zelenou energií mohou urychlit 1D nanostruktury

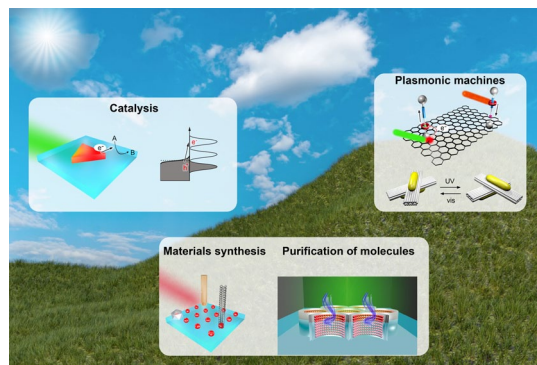


Kment S., Riboni F., Pausova S., Wang L., Wang L., Han H., Hubicka Z., Krysa J., Schmuki P., Zboril R.: Photoanodes based on TiO<sub>2</sub> and α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> for solar water splitting – superior role of 1D nanoarchitectures and of combined heterostructures, *Chemical Society Reviews* 2017, 46, 3716–3769. IF = 38.618

Výroba energie z obnovitelných zdrojů, jako jsou slunce a voda, představuje jednu z největších výzev současné světové vědy. Polovodičové materiály jako oxid titaničitý (TiO<sub>2</sub>) a oxid železitý v krystalové formě hematitu (α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) jsou považovány za nejslibnější materiály k výrobě anod, jejichž pomocí lze na základě fotoelektrochemického štěpení vody získávat vodík. Předností těchto materiálů je jejich vysoká stabilita, netoxičita, snadná dostupnost a nízké výrobní náklady. Navzdory všem výhodám problematický přenos sluncem generovaných nosičů náboje stále značně limituje průmyslové uplatnění této technologie. V přehledovém článku autoři ukazují, že klíčem k překonání tohoto hendikepu je použití TiO<sub>2</sub> a α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> anod ve formě takzvaných jednodimenzionálních (1D) nanostruktur, kterými mohou být nanotrubičky, nanotyče či nanodráty. Tyto 1D nanoarchitektury umožňují zejména efektivní oddělení fotoindukovaných nabitých částic, čímž se značně snižuje jejich opětovná rekombinace. Vlivem 1D morfologie se zvyšuje specifický povrch anody a tím i podíl absorbovaného světla a tedy účinnost fotoelektrochemické (PEC) přeměny. V publikaci vědci popisují řadu syntetických postupů vedoucích k 1D strukturám na bázi TiO<sub>2</sub> a Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Zároveň se věnují dalším strategickým modifikacím 1D anod, jako jsou dopace různými elementy, využití kokatalyzátorů nebo vícerozložkových nano-heterostruktur, které PEC účinnost dále navyšují.

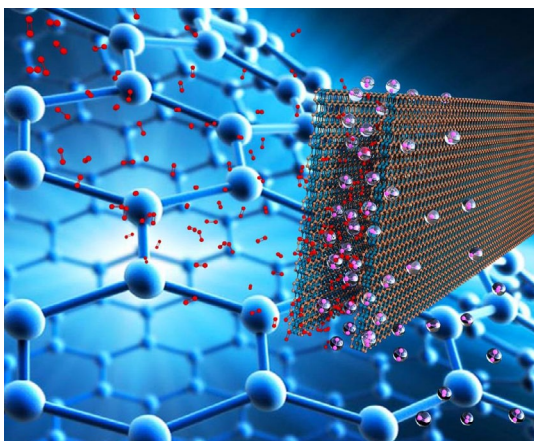
# Využití plasmoniky pro udržitelnou budoucnost

Plasmonické materiály díky svým vlastnostem umožňují nebyvalé využití dopadajícího světelného záření prostřednictvím oblaku elektronů, které se nazývají povrchové plasmony. Článek publikovaný v časopise *Science* poskytuje přehled o tom, jaký může mít plasmonika vliv na mechanismy řízení, kontroly a optimalizace chemických procesů v budoucnosti. Plasmonické materiály například umožňují nový chemismus katalytických reakcí, které jsou obvykle proveditelné pouze za extrémních podmínek. Dalším potenciálním využitím povrchových plasmonů v chemii je intenzivní lokální vytápění. Tento jev lze využít pro zvýšení energetické účinnosti celé řady chemických reakcí, pro řízený růst nanostruktur, čištění vody nebo solární destilaci. Další zajímavou příležitostí je vytvořit plasmonické stroje schopné provádět inteligentní operace, jako je transport molekul a zpracování informací. Plasmonika může pomoci urychlit přechod na čistou a udržitelnou společnost tím, že řídí chemické procesy s přesností a kontrolou v atomovém měřítku.



Naldoni A., Shalae V.M., Brongersma M.L.: Applying plasmonics to a sustainable future, *Science* 2017, 356, 908–909. IF = 37.205

# Nové 2D kompozity pro účinné elektrochemické štěpení vody



Ve společné práci autoři z RCPTM, Technické univerzity v Mnichově a Porúrské univerzity v Bochumi představují vysoce účinný kompozitní elektrokatalyzátor pro reakce uvolnění vodíku (Hydrogen Evolution Reaction – HER) a kyslíku (Oxygen Evolution Reaction – OER), které jsou součástí elektrochemického štěpení vody. Katalyzátor využívá unikátní kombinace dusíkem dopovaného grafenu a sulfidu niklu ( $\text{Ni}_3\text{S}_2$ ) připraveného transformací nikelnaté kovové organické sítě (MOF). Mimořádná elektrokatalytická účinnost je dána velkou plochou povrchu, hierarchickou strukturou kompozitního 2D systému s velkým objemem pórů, přístupností aktivních kovových center a dopací grafenové struktury dusíkem. Díky vysoké účinnosti pro HER i OER reakce a mimořádné stabilitě představuje kompozitní materiál konkurenceschopnou alternativu k doposud používaným a drahým komerčním oxidům na bázi vzácných kovů ( $\text{RuO}_2$  a  $\text{IrO}_2$ ).

Jayaramulu K., Masa J., Tomanec O., Peeters D., Ranc V., Schneemann A., Zbořil R., Schuhmann W., Fischer R.A.: Nanoporous Nitrogen-Doped Graphene Oxide/Nickel Sulfide Composite Sheets Derived from a Metal-Organic Framework as Efficient Electrocatalyst for Hydrogen and Oxygen Evolution, *Advanced Functional Materials*, Article in press, 2017. DOI: 10.1002/adfm.201700451. IF = 12.124

# Další významné publikace

Kou J., Lu C., Wang J., Chen Y., Xu Z., Varma R.S.: Selectivity Enhancement in Heterogeneous Photocatalytic Transformations, *Chemical Reviews* 2017, 117 (3), 1445–1514. IF = 47.928

Kalytchuk S., Adam M., Tomanec O., Zbořil R., Gaponik N., Rogach A.L.: Sodium Chloride Protected CdHgTe Quantum Dot Based Solid-State Near-Infrared Lumiphore for Light-Emitting Devices and Luminescence Thermometry, *ACS Photonics* 2017, 4 (6), 1459–1465. IF = 6.756

Bartali R., Otyepka M., Pykal M., Lazar P., Micheli V., Gottardi G., Laidani N.: Interaction of the Helium, Hydrogen, Air, Argon, and Nitrogen Bubbles with Graphite Surface in Water, *ACS Applied Materials & Interfaces* 2017, 9 (20), 17517–17525. IF = 7.504

Fargašová A., Balzerová A., Pucek R., Htoutou Sedláková M., Bogdanová K., Gallo J., Kolář M., Ranc V., Zbořil R.: Detection of Prosthetic Joint Infection Based on Magnetically Assisted Surface Enhanced Raman Spectroscopy, *Analytical Chemistry* 2017, 89 (12), 6598–6607. IF = 6.320

Tuček J., Pucek R., Kolařík J., Zoppellaro G., Petr M., Filip J., Sharma V.K., Zbořil R.: Zero-Valent Iron Nanoparticles Reduce Arsenites and Arsenates to As(0) Firmly Embedded in Core–Shell Superstructure: Challenging Strategy of Arsenic Treatment under Anoxic Conditions, *ACS Sustainable Chemistry & Engineering* 2017, 5 (4), 3027–3038. IF = 5.951

Štarha P., Vančo J., Trávníček Z.: Platinum complexes containing adenine-based ligands: An overview of selected structural features, *Coordination Chemistry Reviews* 2017, 332, 1–29. IF = 13.324

## Ocenění

### Fyzikální chemik Michal Otyepka je členem Učené společnosti ČR

Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů (RCPTM) posílilo v Učené společnosti České republiky. Po Pavlu Hobzovi a Radku Zbořilovi se jejím řádným členem stal zástupce ředitele RCPTM a držitel ERC grantu Michal Otyepka. Učená společnost o tom rozhodla na svém XXIII. valném shromáždění letos v květnu.



„Dostat se do společnosti předních českých vědců je opravdu obrovská pocta. Chápu to jako ocenění mé práce. Velmi si toho vážím a samozřejmě nezapomínám ani na podporu svých kolegů, bez nichž bych výsledků nedosáhl,“ uvedl Otyepka.

Členové Učené společnosti ocenili jeho dosavadní vědeckou činnost. „Profesor Otyepka je vyzrálým, úspěšným a mezinárodně respektovaným badatelem, jehož členství v Učené společnosti je velkým přínosem. Patří k nejspěšnějším vědeckým pracovníkům v oblasti výpočetní chemie v České republice. V tomto oboru dosáhl řady mimořádných výsledků, které zahrnují vývoj nových výpočetních metod pro analýzu biomolekulárních kanálů a studium jejich biologické úlohy. Významný je rovněž jeho přínos v oblasti simulací nukleových kyselin. Za zásadní je pak třeba považovat jeho výsledky v oblasti takzvané dvourozměrné chemie,“ stojí v odůvodnění nominace.

Dvaatřicetiletý fyzikální chemik byl mimo jiné u zrodu fluorografenu. Ukázal, že ho lze použít pro přípravu různých grafenových derivátů, z nichž některé vykazují unikátní vlastnosti. Podílel se i na objevu prvního nekovového magnetu. Vývoji nových superfunkčních materiálů použitelných v lékařství, při ochraně životního prostředí, v oblasti elektroniky a elektrotechniky nebo ve vysoce účinných katalyzátorech se věnuje i v ERC Consolidator grantu, který získal. Je také držitelem grantu Neuron Impuls udělovaného Nadačním fondem Neuron. Dosud publikoval přes 160 publikací ve vědeckých časopisech, které byly citovány více než 6 000 krát.

Učená společnost sdružuje významné vědce působící v tuzemsku. Byla ustavena 10. května 1994. Pořádá pravidelné přednášky, vyjadřuje se k problémům postavení vědy ve společnosti.

### Indický vědec členem Královské společnosti chemie

Vedoucí výzkumné skupiny RCPTM pro nanokatalýzu Manoj B. Gawande získal od Královské společnosti chemie status „Fellow“. Jedná se o seniorskou kategorii členství v této renomované společnosti, jež opravňuje k užívání titulu FRSC. Přední světová chemická komunita prosazující vynikající výsledky v chemických vědách tímto způsobem oceňuje osobnosti, které v oboru dosáhly vynikajících výsledků.



„Členství v Královské společnosti chemie v Londýně je pro mne velká pocta. Domnívám se, že je to rovněž ocenění vynikajícího přístrojového vybavení a podmínek pro výzkum v RCPTM,“ uvedl Gawande. Ve svém výzkumu se zaměřuje na aplikace pokročilých nanomateriálů pro nanokatalýzu a udržitelnou chemii. V RCPTM působí od roku 2013.

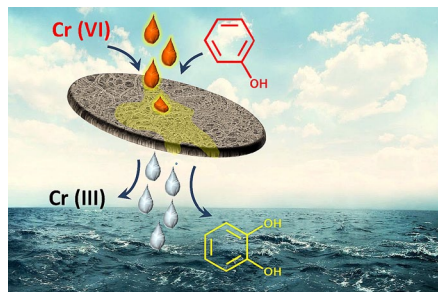
Titulem FRSC se pyšní i další zástupce RCPTM – fyzikální chemik Pavel Hobza.

## Naše granty

### Nanotechnologie – perspektivní pomocník pro čištění vody a půd

K ambici České republiky stát se lídrem v oblasti čištění a úpravy vod a půd přispívá výraznou měrou Centrum kompetence Technologické agentury ČR Nanobiowat pod vedením ředitele RCPTM Radka Zbořila. Partneři ze tří akademických subjektů spolu s největšími tuzemskými sanačními firmami vyvíjejí v rámci tohoto projektu již od roku 2012 nové ekologicky šetrné technologie, které dokáží odstranit organické, anorganické i mikrobiální znečištění nejen z vod, ale i kontaminovaných půd.

„Naši vlnkovou lodí je technologie na bázi nanočástic železa, která dokáže odstraňovat desítky toxických látek redukcí a srážecí cestou. Její obrovskou výhodou je, že jde o tzv. *in situ* proces. Znečištěná voda se proto nemusí čerpat na povrch a není třeba stavět drahé čisticí stanice. Toxické látky jsou převedeny z velmi jedovatých rozpustných fází do netoxických nebo výrazně méně toxických forem přímo v podzemí. Produkty přeměny nanočástic železa jsou v přírodě běžné oxidy železa,“ přiblížil princip čištění podzemních vod Zbořil, autor evropského patentu na technologii, která zajistí povrchovou stabilizaci nanočástic železa (Zbořil R. et al. EU patent č. 2164656, 2014) nezbytnou pro jejich velkokapacitní výrobu. Také díky ní se již nanočástice na bázi železa mohly v tunových množstvích použít pro sanaci několika lokalit v ČR a pilotní ověření nebo sanace se uskutečnily také například v Nizozemsku, Belgii, Německu, Španělsku či USA.



Badatelé z RCPTM se také dlouhodobě věnují popisu mechanismu chování nanočástic železa ve vodním prostředí (Filip J. et al. *J. Phys. Chem. C* 118, 13817–13825, 2014), stejně jako studiu interakcí s klíčovými polutanty, jako jsou těžké kovy z těžby uranu (Klimkova S. et al. *Chemosphere* 82, 1178–1184, 2011), chlorované uhlovodíky (Soukupova J. et al. *Chem. Eng. J.* 262, 813–822, 2015), šestimocný chrom (Petala E. et al. *J. Hazard. Mat.* 261, 295–306, 2013) nebo arzen (Tuček J. et al. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 5, 3027–3038, 2017). Usilují rovněž o rozšíření některých nanotechnologií směrem k čištění povrchových vod, kde se soustředí například na eliminaci sinic (Marsalek B. et al. *Environ. Sci. Technol.* 46, 2316–2323, 2012).

Kromě reduktivních technologií Centrum kompetence Nanobiowat pracuje také na vývoji ekologicky šetrných oxidačních technologií využívajících sloučenin železa ve vysokých oxidačních stavech – tzv. železanů alkalických kovů. Jejich účinnost a mechanismy fungování prokázali vůči celé řadě polutantů včetně arzeničnanů a arzenitanů (Prucek R. et al. *Environ. Sci. Technol.* 47, 3283–3292, 2013), těžkých kovů (Prucek R. et al. *Environ. Sci. Technol.* 49, 2319–2327, 2015), fosforu (Kralchevska R.P. et al. *Water Res.* 103, 83–91, 2016), léčiv, mikroorganismů a jimi produkovaných toxinů (Sharma V.K. et al. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 4, 18–34, 2016; Sharma V.K. et al. *Acc. Chem. Res.* 48, 182–191, 2015). V neposlední řadě pracovníci RCPTM vyvíjejí nové materiály pro pokročilé katalytické aplikace přístupy „zelené chemie“ a s možností jejich recyklace a opakovaného použití (Goswami A. et al. *ACS Appl. Mater. Inter.* 9, 2815–2824, 2017; Gawande M.B. et al. *Chem. Rev.* 116, 3722–3811, 2016; Rathi A.K. et al. *Green Chem.* 18, 2363–2373, 2016; Gawande M.B. et al. *Chem. Soc. Rev.* 44, 7540–7590, 2015).

# Rozhovor

## „V RCPTM oceňuji synergií mezi experimentem a teorií“

**Ještě nedávno těžko představitelné možnosti nabízejí vědcům rastrovací mikroskopy s atomárním rozlišením. Jedním z mála odborníků, kteří dokáží přelomové techniky využít, je fyzik Pavel Jelínek. Od roku 2015 patří do týmu Regionálního centra pokročilých technologií a materiálů.**

**Působíte ve Fyzikálním ústavu AV ČR a v RCPTM pracujete ve skupině Uhlíkové nanostruktury a biomolekuly. Jak k tomuto spojení došlo?**

Jedním z hlavních důvodů je současný rozvoj rastrovací mikroskopie, který umožňuje dosáhnout jedinečného rozlišení molekul na povrchích pevných látek. Pomocí nových technik rastrovací mikroskopie jsme schopni vidět přímo nejen chemickou strukturu molekul, ale také například rozložení náboje uvnitř molekuly. To otevírá zcela nové možnosti pro studium chemických reakcí molekul na povrchích, přenosu náboje v molekulárních systémech nebo studium intermolekulárních interakcí. Na základě těchto skutečností se vedení Centra rozhodlo pořídit nízkoteplotní rastrovací mikroskop. Nicméně obsluha mikroskopu a zejména pak dosažení submolekulárního rozlišení vyžaduje určité zkušenosti. Je potřeba si uvědomit, že v současné době existuje asi 10 až 15 pracovišť ve světě, kde jsou schopni dosáhnout submolekulárního rozlišení. Jsem rád, že k nim patří také RCPTM. Vzhledem k tomu, že ve Fyzikálním ústavu provozujeme podobné přístroje a máme s touto technikou bohaté zkušenosti, byli jsme osloveni ke spolupráci. Myslím, že je to dobrá příležitost posunout dál úroveň nejen rastrovací mikroskopie, ale celé české vědy. Také jsem rád, že dochází ke spolupráci napříč pracovišti univerzity a Akademie věd. Pokud chce být česká věda konkurenceschopná na světové úrovni, je takováto spolupráce nezbytná.

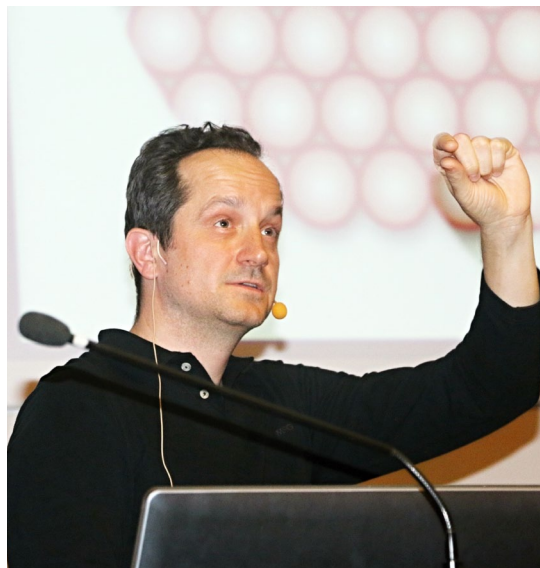
**Na čem konkrétně s kolegy z RCPTM pracujete?**

Jedním z hlavních směrů je studium interakce organických molekul s funkcionalizovaným grafenem. V současné době zkoumáme interakci organometalických molekul s grafenem dopovaným pomocí substituce uhlíku dusíkem. Grafen je znám svojí velmi malou chemickou reaktivitou. Nicméně naše pozorování ukazují, že přítomnost dusíkových defektů má zásadní vliv nejen na uspořádání molekul na povrchu, ale také jejich elektronovou strukturu. To je poměrně překvapivé a otevírá zcela nové možnosti pro ovlivňování chemických vlastností molekul pomocí nekovalentních interakcí s grafenem.

Dále se věnujeme hlubšímu pochopení a dalšímu rozvoji různých zobrazovacích modů umožňujících submolekulární rozlišení. V současné době odesíláme článek, který demonstruje možnost dosažení submolekulárního zobrazení molekul pomocí tunelovacího proudu, frekvenčního posunu a neelastické tunelovací spektroskopie zároveň. Tudiž můžeme dostat poměrně komplexní obrázek o studované molekule, který by nám mohl například v budoucnu umožnit identifikovat chemický původ atomů v dané molekule. Také bychom chtěli začít zkoumat chemické reakce řízené světlem. To by mělo umožnit vytvářet molekulární struktury na povrchích izolátorů, kde není možné indukovat chemické reakce teplem.

**Při jedné z přednášek pro olomoucké studenty jste řekl, že nanotechnologie představují nový způsob myšlení. Můžete to blíže objasnit?**

Myslím, že odpověď na otázku má několik rovin. Tou první je samozřejmě rychlý rozvoj nanotechnologií, který mění výrazně naši



společnost. Například mobilní komunikace jsou do značné míry produktem nanotechnologií. Právě vynález rastrovacích mikroskopů měl zásadní význam pro nástup a rozvoj nanotechnologií.

Tou druhou rovinou je obecné vnímání našeho světa. Pokud by někdo před 50 lety řekl, že chce vidět jednotlivé atomy, většina lidí by se mu vysmála. Ve středověku by ho možná i upálili. Rastrovací mikroskopy významně přispěly k tomu, že dnes již atomy nebereme jako nějaké abstraktní objekty, ale jsou obecně přijímanou realitou. Nejen to, my jsme schopni jednotlivými atomy nebo molekulami fyzicky hýbat, cíleně je přivádět do excitovaných stavů nebo vyvolávat chemické reakce mezi nimi. Aniž si to uvědomujeme, mění to naše vnímání světa.

**Jaké mety máte v nahlížení do nanosvěta za sebou a jaké výzvy vás naopak čekají?**

Myslím, že se nám povedlo několik věcí, které měly slušný ohlas v komunitě rastrovacích mikroskopů. Například chemická identifikace atomů na povrchu pevné látky pomocí mikroskopu atomárních sil, teoretický popis mechanismu submolekulárního rozlišení, rozvoj techniky s vysokým rozlišením, které umožňují nejen zobrazení chemické struktury molekul, ale také rozložení náboje uvnitř molekul. Dále se nám podařilo demonstrovat piezoelektrický efekt na molekulární úrovni nebo kontrolu jednoelektronových stavů v rámci molekuly.

Výčet všech výzev by byl poměrně dlouhý a jsem si jist, že další na nás čekají za rohem.

Například do budoucna bychom rádi studovali molekuly v excitovaném stavu, zejména pak zobrazení rozložení náboje. Další výzvou pro nás je možnost dosažení spinového rozlišení na jednotlivých molekulách. Také bychom se rádi pokusili o demonstraci konceptu molekulárních kvantových celulárních automatů pomocí jednoelektronových nábojových stavů v molekulách na bázi ferocenu. Výzvou je také měření transportu skrze jednotlivé molekuly, zejména pak hlubší pochopení vztahu mezi proudem a jím indukovanými silami, které působí na molekulu.

## Jaké přístroje v RCPTM jsou vašimi nejčastějšími pomocníky? Jak hodnotíte infrastrukturu Centra, například i v porovnání se zahraničím?

Hlavním nástrojem pro náš výzkum je nízkoteplotní rastrovací mikroskop, který pracuje v ultravysokém vakuu. Jedná se o komerční přístroj od firmy Createc, jenž v současné době dle mého názoru představuje jeden z nejlepších mikroskopů na trhu.

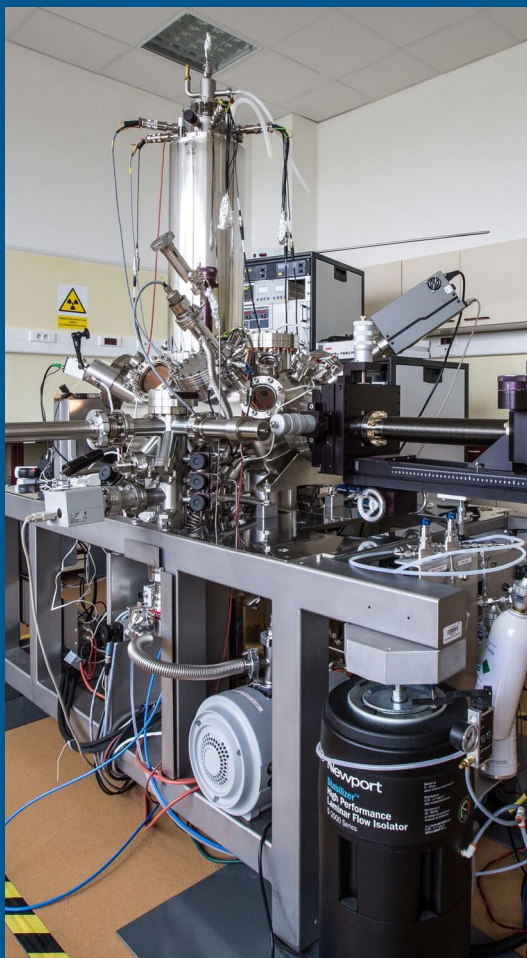
Myslím, že vybavení RCPTM je na vysoké úrovni a snese porovnání se špičkovými pracovišti podobné velikosti ve světě. Nicméně bych chtěl podotknout, že samotné vybavení ještě negarantuje vynikající výsledky. Občas slyším názory, ze kterých mám pocit, že každý nákladný přístroj obsahuje také tiskárnu na špičkové články. Bohužel, nebo bohudík, tomu tak není. Je potřeba kombinace originální myšlenky, přístroje a schopného vědeckého týmu. V Olomouci dnes budujeme mezinárodní laboratoř, kterou povede náš španělský kolega Bruno de la Torre, který má výbornou zkušenost právě s prací na grafenových površích. Co oceňuji na RCPTM, je nejen velké

množství nápadů, ale také silné teoretické zázemí, které umožňuje přesně interpretovat experimentální výsledky. Bez této synergie mezi experimentem a teorií je dnes prakticky nemožné uspět na nejvyšší úrovni.

## Letos jste se svými tuzemskými i japonskými kolegy pronikli do Nature Communications s novou metodou, díky níž dokážete stanovit elektronegativitu atomu na povrchu pevné látky a dokonce i určit její závislost na chemickém okolí měřeného atomu. Můžete nám říct více?

Tato metoda je vhodná pro studium jednotlivých atomů na povrchu pevné látky. Bohužel není plně přenositelná na jednotlivé atomy tvořící molekuly. Některé skupiny ve světě se dnes snaží aplikovat ji na různé povrchy, třeba oxidů kovů. Cílem je hlouběji pochopit význam různých defektů na površích například pro katalytické aplikace.

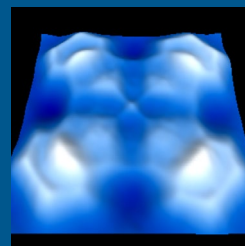
## Představujeme vědeckou infrastrukturu



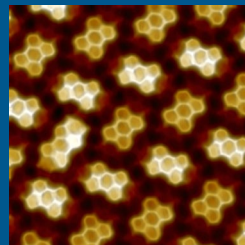
Nízkoteplotní rastrovací mikroskop pracuje v prostředí ultravysokého vakuu při teplotě pět kelvinů s atomárním rozlišením. Rastrovací mikroskop od firmy Createc umožňuje současně měření tunelovacího proudu (STM Scanning Tunneling Microscopy) a atomárních sil (AFM Atomic Force Microscopy) s atomárním rozlišením a také detekci vibračních módů molekul pomocí neelastické tunelovací spektroskopie nebo zobrazení rozložení elektrostatického potenciálu v molekulách na površích pevných látek.

Vhodnou funkcionalizací hrotu mikroskopu, kdy se na jeho vrchol umístí právě jeden atom (xenon, chlor) nebo molekula (např. CO), lze dosáhnout submolekulárního rozlišení jednotlivých molekul na povrchu pevné látky. Tyto obrázky v mnoha případech ukazují přímo chemickou strukturu studované molekuly. Mikroskop umožňuje nejen zobrazovat jednotlivé molekuly, ale také s nimi cíleně manipulovat a přepínat do různých konformací.

Obrázek molekuly ftalocyaninu železnatého (FePc) na povrchu stříbra (111) pořízený mikroskopem atomárních sil s hrotem, který je zakončen právě jednou molekulou CO. Takto funkcionalizovaný hrot umožňuje přímo rozlišit chemickou strukturu molekuly.



Obrázek samospořádané vrstvy molekul PTCDA (3, 4, 9, 10-perylenetetracarboxylic dianhydride) na povrchu zlata (111) pořízený mikroskopem atomárních sil s hrotem zakončeným CO molekulou.



### Vybrané reference:

Sugimoto Y. et al. *Nature* 446, 64–67, 2007; Stetsovych O. et al. *Nat. Chem.* 9, 213–218, 2017; Sugimoto Y. et al. *Science* 322, 413–417, 2008.

# Naši absolventi

„Nejdůležitější je ten velký aha moment“

Letos v červnu ukončila doktorské studium Kateřina Holá, která úspěšně obhájila dizertační práci s názvem **Functional groups on carbon nanomaterials: the matter that matters**. Mladá vědkyně se v RCPTM věnuje především přípravě nových uhlíkových materiálů a během doktorátu si na své konto připsala 17 publikací včetně *Nature Communications* nebo *Chemical Reviews*. Absolvovala stáže v Řecku a Španělsku a za práci, jejímž ústředním tématem byly uhlíkové kvantové tečky, získala vloni v kategorii chemie druhé místo v soutěži vyhlašované Velvyslanectvím Francie v ČR o Cenu Jean-Marie Lehna.

Sama však o úspěších, kterých v období od září 2012 dosáhla, hovoří nerada. „Není spíše důležitější otázka: Jaká je opravdu realita vědy, kterou nikdo zvenčí nevidí? Vědci totiž nejsou superhrdinové, ale spíše masochisté, v nadneseném slova smyslu. Frustrace z věčně nepovedených experimentů, nekonečná práce nad vyhodnocováním výsledků, které nedávají smysl, neustálá kritika vaší práce od recenzentů,

poté vám nevyjde grantová podpora a k tomu přidejte věčné papírování. Prostě masochisté! A čím lepší vědec, tím větší masochista. Důvod, proč to ale všichni vědci dělají, je TEN VELKÝ AHA MOMENT. Prostě chvíle, kdy vás vaše zvědavost zavede do míst, kde nikdo nikdy nebyl, nebo chvíle, kdy vše začne konečně dávat smysl a vy máte pocit, že jste u něčeho velkého. Sama bych to přirovnala k nenadálému pocitu zamilovanosti, kdy máte prostě žaludek na vodě jenom kvůli experimentu. To je přesně ten důvod, proč jsou vědci masochisté. To je ta droga, kvůli které vydržíte neustálou frustraci. Jediná opravdu důležitá otázka je, zda vás to baví a jestli je ta vaše droga dostatečně silná. A pokud tedy mám opravdu napsat něco o sobě, tak leda to, že jsem zamilovaný masochista, pro kterého se věda stala silnou drogou a skvělou zábavou zároveň!“



## Připravujeme...

Zahradníkovskou sérii poctí návštěvou odborník na katalýzu Paolo Fornasiero



Dalším hostem přednáškového cyklu Rudolf Zahradník Lecture Series bude Paolo Fornasiero z Univerzity v Terstu. Přední odborník v oblasti materiálové chemie v Olomouci vystoupí 16. října. Cílem série, kterou RCPTM pořádá od roku 2013, je představovat na půdě Univerzity Palackého významné světové osobnosti chemického a materiálového výzkumu.

Profesor Fornasiero (\*1968) se zaměřuje na materiálovou chemii, a to zejména na design a vývoj multifunkčních nanosystémů oxidů kovů určených pro pokročilé aplikace v energetice, heterogenní katalýze a životním prostředí. Je mimo jiné výzkumným pracovníkem italského Národního výboru pro výzkum (CNR) a jedním z editorů časopisu Americké chemické společnosti ACS Catalysis. Za svou práci získal řadu ocenění, z nichž nejvýznamnější je Cena Heinze Heinemanna za vývoj nových nanostrukturálních katalyzátorů udělovaná IACS (International

Association of Catalysis Societies). Paolo Fornasiero má na svém kontě více než 220 publikací včetně několika prací v časopise *Science* (např. Cargnello M. et al. *Science* 341, 771–773, 2013; Cargnello M. et al. *Science* 337, 713–717, 2012) a v časopisech *Nature* family (např. Zhang S. et al. *Nat. Commun.* 6, 7778, 2015). Jeho H-index činí 58.

## O působení v RCPTM a výzkumu nukleových kyselin pohovoří Jiří Šponer

V pravidelné rubrice Rozhovor představíme výzkum profesora Jiřího Šponera, jednoho z nejcitovanějších českých vědců, který působí v RCPTM a Biofyzikálním ústavu AV ČR v Brně. Je členem Učené společnosti České republiky a za svůj výzkum v oblasti nukleových kyselin získal řadu ocenění včetně Ceny Akademie věd ČR, Prémie Otto Wichterleho, Ceny ministra školství, mládeže a tělovýchovy ČR nebo Akademické prémie AV ČR. Kromě nedávných prací, které publikoval pod hlavičkou RCPTM (např. Bottaro S. et al. *J. Phys. Chem. Lett.* 7, 4032–4038, 2016; Figiel M. et al. *Nucleic Acids Res.* 45, 3341–3352, 2017), prozradí profesor Šponer další pokrok ve studiu mechanismu vzniku života na naší planetě.



## Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů

Šlechtitelů 27  
783 71 Olomouc

Telefon: (+420) 58 563 4973

Email: rcptm@upol.cz

Web: www.rcptm.com

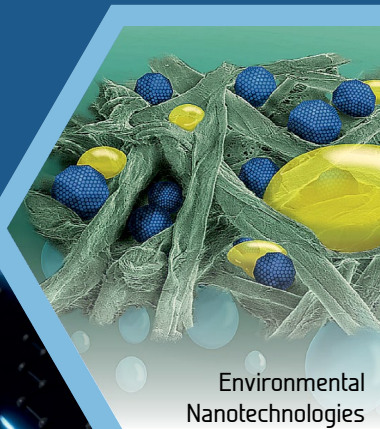
Facebook: www.facebook.com/rcptmcz

Vydalo: Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, 2017  
Editor: Martina Šaradinová; Foto: Viktor Čáp, Martin Pykal, archiv RCPTM  
Grafické zpracování: Ondřej Růžička

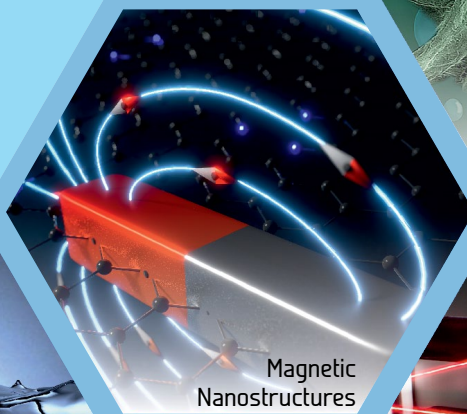


# REGIONAL CENTRE OF ADVANCED TECHNOLOGIES AND MATERIALS

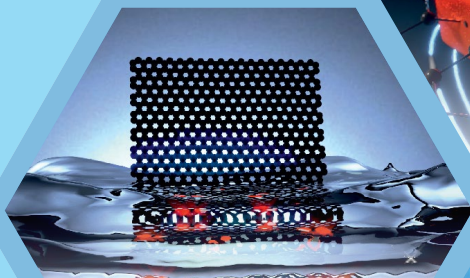
## RESEARCH GROUPS



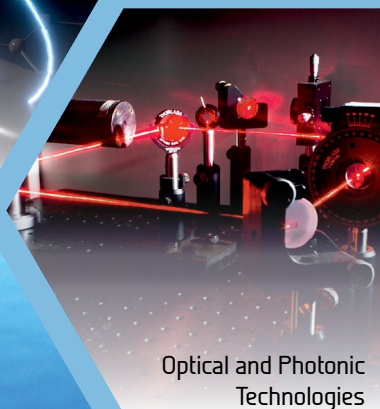
Environmental  
Nanotechnologies



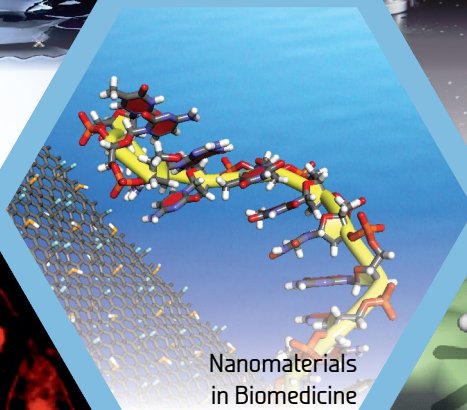
Magnetic  
Nanostructures



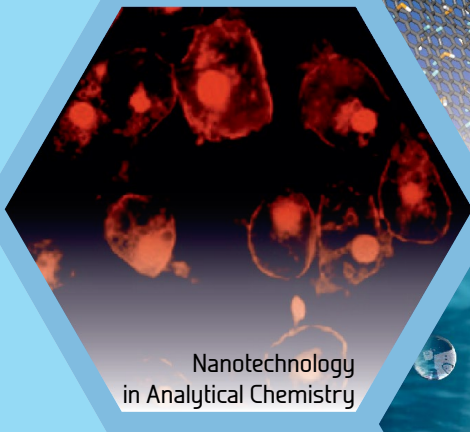
Carbon Nanostructures,  
Biomacromolecules  
and Simulations



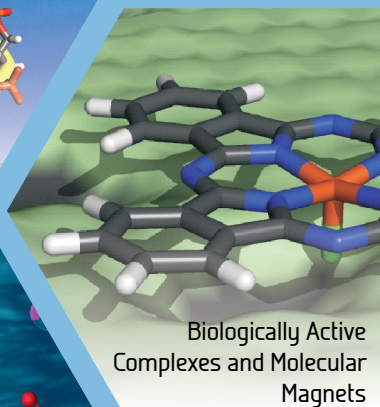
Optical and Photonic  
Technologies



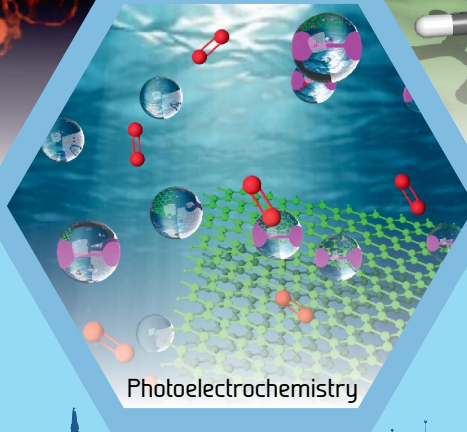
Nanomaterials  
in Biomedicine



Nanotechnology  
in Analytical Chemistry



Biologically Active  
Complexes and Molecular  
Magnets



Photoelectrochemistry