

Co nám prozradí rentgen? Nový GAČR výzkum docentky Evy Muchové sleduje chování molekul na nejmenší úrovni

20.3.2025 - | Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Jak byste v několika větách popsala laikovi o čem váš projekt je a proč je důležitý?

Můj projekt se zaměřuje na využití a vývoj teoretických metod pro fotochemii a spektroskopii v rentgenové oblasti, tedy v oblasti energetičtější než běžné světlo. Tyto nástroje nám pomohou pochopit, jak se třeba přesouvá elektronová hustota nebo jak funguje reaktivita některých molekul, což jsou velmi důležité chemické otázky. Celý projekt je sice většinou teoretický, ale je velmi úzce propojený s experimentem.

Co vás inspirovalo k výběru tématu? Byla to konkrétní výzva, kterou jste chtěli řešit, nebo spíše přirozené pokračování vaší dosavadní práce?

Inspirací mi byla současná práce, kdy vidíme, že současné teoretické nástroje nestačí k plnému využití potenciálu rentgenových spektroskopií. Jde také o přirozené pokračování mé předchozí práce, která se zabývala vývojem metod pro pochopení elektronických vlastností molekul.

Co je hlavním cílem vašeho výzkumu?

Cílem je vývoj teoretického rámce pro rentgenové spektroskopie a pro moderní laserové experimenty prováděné s velkým časovým i energetickým rozlišením.

Co myslíte, že porotu zaujalo nejvíce?

Myslím, že úzké provázání s experimentem, který se provádí typicky na velkých zařízeních jako jsou synchrotrony nebo lasery s volnými elektrony. Tyto experimenty jsou velmi náročné a teorie nutná k jejich plnému porozumění pořád trochu kulhá.

Přinese projekt nějaké konkrétní aplikace nebo technologie?

Projekt je čistě základní výzkum, tj. nemíříme primárně ani na aplikace ani na technologie. Některé výsledky ale můžou mít praktický dopad, třeba když lépe porozumíme mechanismům molekulových přepínačů nebo vyvineme praktické spektroskopické nástroje využitelné pro širší komunitu.

V čem je váš projekt unikátní?

Nevím, jestli je něčím konkrétním unikátní, spojuje v sobě ale teorii a experiment, které jsou nutné pro pochopení dějů, které studujeme. Jedno bez druhého je nepoužitelné.

S kým na projektu spolupracujete?

V rámci VŠCHT spolupracuji s doc. Uhlíkovou a s doc. Kovaříčkem, spolunavrhovatelkou projektu je Dr. Dana Nachtigallová s ÚOCHB AV ČR. V projektu, jak jsem zmínila, spolupracujeme se zahraničními experimentálními týmy, hlavně s Dr. Rebeccou Ingle z UCL, s prof. Olle Björneholmem z Univerzity v Uppsale a s velkým týmem Dr. Marca Simona ze Sorbonne a CNRS.

Jaké překážky nebo výzvy očekáváte během realizace projektu? Máte už strategii, jak je překonat?

Pro realizaci projektu je určitě nutné zajistit experimentální čas na synchrotronech, na každý experiment je nutné psát zvláštní návrh projektu, který je posuzován odbornou komisí. Na těchto zařízeních se typicky sejde mnoho žádostí, takže je možné, že se některé experimenty v době projektu jednoduše nestihnou. Ale teoreticky bychom měli být dobře připraveni to zvládnout, týmu věřím.

Co vám dělá na projektu největší radost?

Na projektu mi dělá největší radost tým lidí, se kterými můžu pracovat. To je pro mě zásadní věc a jsem velmi ráda, že tolik skvělých lidí má zájem se na projektu podílet.

Co by teoreticky mělo navazovat na váš výzkum až projekt skončí?

Projekt je jen částí skládačky porozumění možnostem, kterém nám dávají rentgenové paprsky pro popis a manipulaci s molekulami. Doufám, že i díky tomuto projektu budeme schopni lépe rozumět experimentům, sami je designovat a pouštět se do ještě odvážnějších.

<https://www.vscht.cz/popularizace/rozhovory/muchova-gacr-2025>