

Výpočty z VŠCHT podpořily studii světlem řízené niklové katalýzy v Nature Catalysis

30.9.2026 - Jakub Drahonský | Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Výzkumníci z Institute of Science and Technology Austria (ISTA) představili nový způsob niklové katalýzy aktivované světlem, který umožňuje provádět synteticky významné chemické reakce s výrazně nižším množstvím niklu než dosavadní metody. Na studii publikované v časopise Nature Catalysis se podílel také Daniel Bím z VŠCHT Praha, který k objasnění fungování katalytického systému přispěl pomocí kvantově-chemických výpočtů.

Vytváření vazeb mezi uhlíkem a dusíkem, kyslíkem, sírou či fosforem patří k základním krokům při syntéze léčiv a dalších komplexních molekul. V řadě těchto reakcí se tradičně uplatňuje palladium. Nikl nabízí levnější a dostupnější alternativu, ale jeho reaktivita bývá obtížněji kontrolovatelná a některé aktivní formy katalyzátoru mohou podléhat nežádoucím reakcím vedoucím ke ztrátě účinnosti. Jeho využití ve světlem řízených reakcích dosud navíc často omezovala potřeba relativně vysokého množství katalyzátoru, úzký rozsah použitelných látek a deaktivace reaktivních forem niklu. Výzkumný tým Bartholomäuse Piebera z ISTA nyní ukázal, že tato omezení lze překonat vhodným návrhem ligandu, který upravuje elektronové vlastnosti niklu.

Nový systém pracuje pod viditelným světlem a na rozdíl od mnoha příbuzných metod nevyžaduje samostatný fotokatalyzátor. Nová metoda umožňuje provádět široké spektrum reakcí a funguje také s některými substráty, které byly pro podobné niklové katalýzy dosud obtížně použitelné. V některých reakcích přitom stačilo pouze 100 ppm niklového katalyzátoru, což odpovídá jedné jeho molekule na 10 000 molekul substrátu.

Výzkum byl mimo jiné podpořen také projektem **Junior STAR (GAČR)**, v jehož rámci se **Daniel Bím na VŠCHT Praha věnuje právě vztahům mezi strukturou niklových komplexů, jejich stabilitou a reaktivitou**. Cílem tohoto výzkumu je využít poznatky o vlivu ligandů k racionálnímu návrhu účinnějších niklových katalyzátorů pro fotochemicky a elektrochemicky řízené reakce. Studie tak zapadá do širšího úsilí o vývoj efektivnějších a udržitelnějších postupů pro syntetickou organickou chemii.

Jde již o **druhou letošní publikaci Daniela Bíma v časopise Nature Catalysis**. V červnu se podílel na mezinárodní práci vedené laboratoří Joshuy Barhama, na níž spolupracoval také s Tomášem Slaninou a kolegy z ÚOCHB. Studie představila nový přístup k funkcionalizaci alifatických vazeb C-H pomocí organických fotokatalyzátorů, mimo jiné v kombinaci právě s niklovou katalýzou.

Odkaz na článek: <https://www.nature.com/articles/s41929-026-01616-6>

<https://www.vscht.cz/popularizace/cim-se-zabyvame/daniel-bim-nature-catalysis>