

Tříletý grant je obrovskou pomocí. Dává mi čas vybudovat tým

1.4.2025 - | Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Můžete nám přiblížit svůj oceněný projekt a jeho hlavní cíle?

Projekt se zaměřuje na porézní materiály, jako jsou MOFy (metal-organic frameworks) a COFy (covalent organic frameworks). Tyto látky se skládají ze dvou základních částí: lineární molekuly (tzv. linkeru) a spojovacího centra. Spojovacím centrem může být buď atom kovu (u MOFů), nebo organická látka (u COFů). Linkery jsou rigidní molekuly, které se vážou na centrum a společně vytvářejí krystalickou mřížku s porézní strukturou.

A protože příroda nemá ráda volné prostory, jedním z problémů je tzv. interpenetrace, tedy tvorba další krystalické mřížky uvnitř původní, což ovlivňuje velikost pórů. To je problém zejména proto, že vlastnosti těchto materiálů úzce souvisí právě s velikostí jejich pórů. Cílem projektu je zamezit této interpenetraci, aby bylo možné připravit materiály s většími póry.

Jak lze této interpenetraci zabránit?

Můj přístup využívá mechanické vazby jako chránicí skupiny. Mechanická vazba je takové vzájemné uspořádání molekul, které znemožňuje jejich oddělení. Například v případě tzv. rotaxanů je mechanickou vazbou okolo lineární molekuly navázán nějaký makrocycklus. Díky tomu, že lineární molekula má na svých koncích stericky objemné skupiny, makrocycklus z ní nemůže sklouznout. Představte si to jako prsten, který je navlečený na tyčku, která je na koncích rozšířená – prsten tedy nemůže tyčku opustit. A protože tyto „prstény“ bývají poměrně objemné, měly by být schopny zabránit interpenetraci. Klíčovým krokem mého výzkumu je navrhnout „prsten“ tak, aby šel po vytvoření porézního materiálu odstranit, což umožní připravit materiály s daleko většími póry, než jaké jsou dostupné nyní.

K čemu takové molekuly využijeme?

MOFy a COFy jsou velice populární materiály se širokým spektrem použití. Používají se například ke skladování plynů, jejich separaci, v organokatalýze atd. Záleží už jen na tom, jak konkrétní materiály nadesignujeme a jak velké póry vytvoříme.

Co vás inspirovalo k výběru tématu?

Strávil jsem dva roky v Anglii ve skupině profesora Goldupa, která se specializuje na mechanické vazby. Mám k tomuto tématu tedy poměrně dobrý background. Skupina se ale zabývá malými molekulami, zatímco já se chci soustředit na jejich využití v materiálech, takže se problematiku materiálové chemie a aplikací budu učit za běhu.

Proč jste se tedy rozhodl pro velké molekuly?

Během své stáže v Anglii jsem se zúčastnil přednášky profesora Yagiho, což je velké jméno v oblasti porézních materiálů. Hrozně mě zaujalo, co všechno se s těmito materiály dá dělat. Ukazoval nám například video, jak pomocí podobných materiálů vyložené čerpal vodu ze vzduchu. To mě zaujalo tak, že jsem si řekl, že spojením s mechanickou vazbou může vzniknout něco zajímavého.

Očekáváte během výzkumu nějaké výzvy, kterým budete muset čelit?

Neexistuje moc popsaných reakcí, kterými lze tyto polymerní struktury modifikovat. Abych tedy byl schopen provést post-syntetickou modifikaci, tedy odbourat makrocyklus („prsten“), budu muset najít takové skupiny, které budou schopné reagovat v rámci polymerní struktury. Jde o nerozpustné látky, takže potřebujete nějakou jednoduchou reakci, která bude schopna kvantitativně odbourat makrocykly i v pevné fázi. Zároveň však makrocyklus nesmí být příliš nestabilní, protože zejména v případě COFů bývají podmínky jejich vzniku poměrně kruté. Je tedy nutné nadesignovat makrocyklus tak, aby byl za určitých podmínek stabilní, a naopak v jiných podmínkách nestabilní.

Jak budete hledat ty správné molekuly?

Primárně experimentálně. Mám několik nápadů na systémy, které by mohly fungovat. Nejjednodušší je nasyntetizovat si nějaký makrocyklus a zkusit, zda je odbouratelný vyhovujícím způsobem, a zároveň otestovat stabilitu v rámci jiných podmínek. Je očekávatelné, že různé makrocykly budou pravděpodobně použitelné pro syntézu různých typů porézních materiálů.

A matematicky předvídat struktury půjde?

Pro výzkum budeme určitě využívat klasickou výpočetní chemii. V dnešní době se zároveň v této oblasti využívá umělá inteligence, ale tam je třeba vytvořit model a vycvičit jej na dostupných datech. Protože je náš přístup inovativní, taková data zatím nemáme. Až je budeme mít, mohla by nám umělá inteligence rozhodně pomoci, ale na to budu určitě potřebovat navázat nějakou spolupráci.

Budete tedy shánět kolegy do vašeho týmu i externisty pro spolupráci?

Ano. Zatím jsem nikoho k externí spolupráci nehledal, ale až budu mít první materiály v ruce, budu potřebovat navázat spolupráci minimálně s materiálovými chemiky, protože bude potřeba charakterizovat vlastnosti připravených materiálů. Později by bylo vhodné spolupracovat i s výpočetními chemiky, což by mohlo celý výzkum urychlit.

Do svého týmu ale již nyní hledám organické chemiky. První fáze projektu je zejména o vytváření mechanických vazeb, respektive prekurzorů pro MOFy a COFy, což je prakticky čistě syntetická práce.

Plánujete navázat na tento výzkum dalšími projekty? Pokud ano, jakými směry se chcete ubírat?

Jeden z důvodů, proč jsem si toto téma vybral, je právě aplikovatelnost. Pokud se zadaří, nápady a samotný výzkum se budu snažit převést do praxe.

Jak hodnotíte podporu Fondu Dagmar Procházkové při realizaci vašeho výzkumu?

Grant je obrovskou pomocí, zejména proto, že podpora je nyní tříletá, což mi dává více času na vybudování týmu. K dispozici mám 2 miliony Kč ročně, což mi umožní financovat první doktorské studenty a vytvořit stabilní základy pro další výzkum.

Budete žádat o další granty?

Ano, finanční zdroje jsou důležité pro běh výzkumného týmu a tři roky utečou rychle.

Máte už vymyšleno něco konkrétního, s čím byste chtěl žádost podat?

Ano mám, ale zatím své plány nebudu prozrazovat.

Máte nějaké další ambice do budoucna, ať už osobní, nebo profesní?

Mojí momentálně největší profesní ambicí je vybudovat vlastní kvalitní výzkumnou skupinu a začít publikovat v tom směru, který jsem si vybral.

Co byste doporučil mladým vědcům, kteří zvažují podání žádosti o podobné granty?

Nebát se a podat přihlášku. Fond Dagmar Procházkové má méně administrativních požadavků než jiné granty, například GAČR. Zároveň se tím naučí psát žádosti, což je cenná dovednost. A hlavně, jak rád říkám, kdo nežádá, grant nedostane.

<https://www.vscht.cz/popularizace/rozhovory/martin-tlusty-spin>