



**ÚOCHB** AV  
IOCB PRAGUE

Ústav organické chemie a biochemie  
Akademie věd České republiky, v. v. i.  
Institute of Organic Chemistry and Biochemistry  
of the Czech Academy of Sciences

TISKOVÁ ZPRÁVA

## Čeští vědci dál posunují možnosti zobrazovacích technik a odhalují tajemný svět molekul

29. 8. 2023

**Vědci z ÚOCHB, Fyzikálního ústavu AV ČR a z Univerzity Palackého v Olomouci znovu úspěšně odkrývají tajemství světa molekul a atomů. Experimentem potvrdili správnost dekády staré teorie, která předpokládala nerovnoměrné rozložení elektronové hustoty v aromatických molekulách. Tento jev významně ovlivňuje fyzikálně-chemické vlastnosti molekul i jejich interakce. Zmíněný výzkum rozšiřuje možnosti designování nových nanomateriálů a článek o něm aktuálně zveřejnil vědecký časopis *Nature Communications*.**

V předchozí přelomové studii popsal stejný autorský tým v časopise *Science* nerovnoměrné rozložení elektronů v atomu, tzv. sigma-díru ( $\sigma$ -díru). Nyní výzkumníci potvrdili existenci tzv. pí-díry ( $\pi$ -díry). V aromatických uhlovodících najdeme aromatické elektrony v oblacích nad a pod uhlíkovým skeletem. Nahradíme-li periferní vodíky elektronegativnějšími atomy či skupinami atomů, které odtahují elektrony, změní se původně záporně nabitě oblaky na kladně nabitě elektronové díry.

Vědci využili pokročilou metodu rastrovací mikroskopie a dál posunuli její možnosti. Zmíněná metoda pracuje v subatomárním rozlišení, a dokáže proto zobrazit nejen atomy v molekulách, ale i strukturu elektronového obalu atomu. Jak připomíná jeden ze zainteresovaných výzkumníků Bruno de la Torre, vedoucí vědecké skupiny z Českého institutu výzkumu a pokročilých technologií UPOL (CATRIN), za úspěchem popsaného experimentu stojí zejména skvělé vybavení jeho domovského pracoviště a účast vynikajících doktorandů.

*„Díky našim předchozím zkušenostem s technikou silové mikroskopie s Kelvinovou sondou s funkcionalizovanými hroty (KPFM) jsme byli schopni naše měření zpřesnit a získat velmi kompletní soubory dat, které nám pomohly prohloubit naše znalosti nejen o tom, jak je v molekulách rozložen náboj, ale také o tom, jaké pozorovatelné údaje se touto technikou získávají,“* popisuje Bruno de la Torre.

Moderní silová mikroskopie je doménou výzkumníků z Fyzikálního ústavu dlouhodobě. Nebývalé prostorové rozlišení naplno využili nejen v případě molekulárních struktur. Před časem potvrdili existenci nerovnoměrného rozložení elektronové hustoty kolem atomů halogenů, tzv.  $\sigma$ -děr. Tento úspěch zaznamenal v roce 2021 jeden z nejuznávanějších světových vědeckých časopisů, časopis *Science*. Na tehdejší i současném výzkumu se významně podílel i jeden

z nejcitovanějších českých vědců současnosti prof. Pavel Hobza z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR.

*„Potvrzení existence  $\pi$ -díry stejně jako před tím  $\sigma$ -díry plně dokládá, jak kvalitní jsou teoretické předpovědi kvantové chemie, které s oběma jevy počítají už celá desetiletí. Ukazuje se, že se na ně lze spolehnout i v případě, kdy chybí dostupný experiment,“ říká Pavel Hobza.*

Výsledky výzkumu českých vědců na subatomární a submolekulární úrovni je možné přirovnat k objevu vesmírných černých děr. I s nimi totiž desítky let počítala teorie, než jejich existenci potvrdil experiment. Vědeckému světu pomůže lepší znalost rozložení elektronového náboje v první řadě pochopit řadu chemických i biologických procesů. V praktické rovině se promítne do schopnosti stavět nové supramolekuly a následně ve vývoji moderních nanomateriálů s vylepšenými vlastnostmi.

Původní článek: B. Mallada, M. Ondráček, M. Lamanec, A. Gallardo, A. Jiménez-Martin, B. de la Torre, P. Hobza, P. Jelínek, Visualization of  $\pi$ -hole in molecules by means of Kelvin probe force microscopy. *Nat Commun* 14, 4954 (2023). <https://doi.org/10.1038/s41467-023-40593-3>

---

**Ústav organické chemie a biochemie AV ČR / ÚOCHB ([www.uochb.cz](http://www.uochb.cz))** je přední mezinárodně uznávaná vědecká instituce, jejímž hlavním posláním je základní výzkum v oblasti chemické biologie a medicínální chemie, organické a materiálové chemie, chemie přírodních látek, biochemie a molekulární biologie, fyzikální chemie, teoretické chemie a analytické chemie. Nedílnou součástí poslání ÚOCHB je přenos výsledků základního výzkumu do praxe. Důraz na mezioborové zaměření výzkumu ústí do řady aplikací v medicíně, farmacii a dalších odvětvích.

---

#### KONTAKT PRO NOVINÁŘE:

Veronika Sedláčková (ÚOCHB – Komunikace): [veronika.sedlackova@uochb.cas.cz](mailto:veronika.sedlackova@uochb.cas.cz)

mob: +420 602 160 135



Univerzita Palackého  
v Olomouci