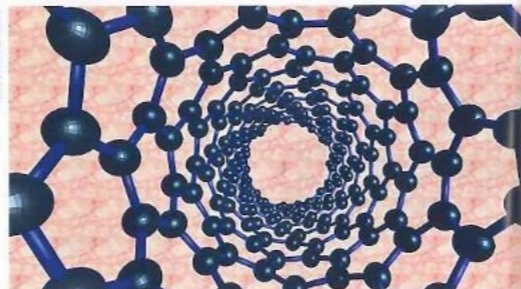


Nové materiály pro získávání a ukládání energie. Nanoroboti, kteří budou v lidském těle odhalovat či likvidovat zárodky nemocí. Látky, jež urychlí a zefektivní řadu chemických reakcí v průmyslové výrobě. **Nejlepší chemici Česka a další desítky geniálních vědců ze tří prestižních vysokých škol se**

LEPŠÍ BUDOUCNOST

Projekt **TECHSCALE** reaguje na nejpálčivější společenské výzvy dneška – klimatické změny, energetickou krizi, potřebu zlepšit kvalitu života. Posláním pětiletého výzkumu je navrhnout novou generaci nanomateriálů pro aplikace v energetice, katalýze, senzingu (nejrychlejší způsob, jak do aplikací přidat přesné porovnávání dat a analýzu vztahů), ale i teranostice (diagnostika terapie u jednotlivého pacienta). Součástí projektu je také posuzování společenských dopadů a přijetí nových technologií ze strany veřejnosti. Z toho důvodu se v řešitelském týmu propojí zástupci přírodních, sociálních a humanitních věd.



■ Projekt **TECHSCALE** s využitím tzv. atomárního inženýrství může přinést revoluci v medicíně, chemii i energetice.

ukládání energie, chemické katalýze v chemickém a farmaceutickém průmyslu, diagnostice některých onemocnění

# Úsvit atomárního inženýrství: Češi míří za hranice nanosvěta

zapojili do projektu **Tech-nologie za hranicí nanosvěta (TECHSCALE)**, aby vyvinuli a využili revoluční metody atomárního inženýrství.

Pětiletý výzkum, který povede Univerzita Palackého (UP) spolu s Univerzitou Karlovou a brněnským CEITEC-VUT, uspěl v prestižní výzvě **Špičkový výzkum operačního programu Jan Amos Komenský** a získal podporu téměř půl miliardy korun.

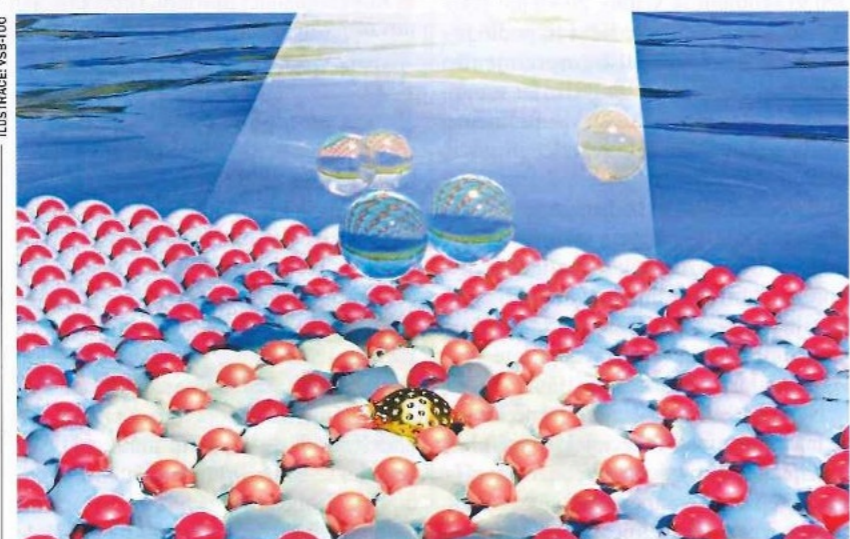
Na projektu se spolupodílejí nejlepší a nejcitovanější vědci České republiky – **Radek Zbořil, Michal Otyepka** nebo **Martin Pumera** –, kteří se při řešení propojí s kolegy z pěti fakult Univerzity Palackého spolu s vědci z Univerzity Karlovy a CEITEC VUT. Technologie za hranicí nanosvěta se tak stává nejambicióznějším interdisciplinárně zaměřeným výzkumem s neuvěřitelným potenciálem pro běžné využití. „*To nám umožní posílit naše výzkumné úsilí, dosáhnout ještě významnějších výsledků a výrazně přispět k rozvoji vědy a technologií v naší společnosti,*“ uvedl ředitel **CATRIN Pavel Banáš**.

„Očekáváme zásadní objevy, které posunou hranice současných nanotechnologií a najdou uplatnění například při

i jejich léčbě. Součástí projektu je mimo jiné i vývoj nových materiálů pro antimikrobiální terapii a pro boj s bakteriál-

„*Naším cílem je vyvinout nové typy multifunkčních jednoatomárních katalyzátorů, díky nimž by na jednom nosiči mohlo vedle sebe probíhat několik různých reakcí. Věřím, že v průběhu řešení tohoto projektu získáme řadu nových a velice zajímavých výsledků ve spolupráci s našimi partnery ze špičkových českých pracovišť, ale i ze zahraničí.*“

prof. Jiří Čejka

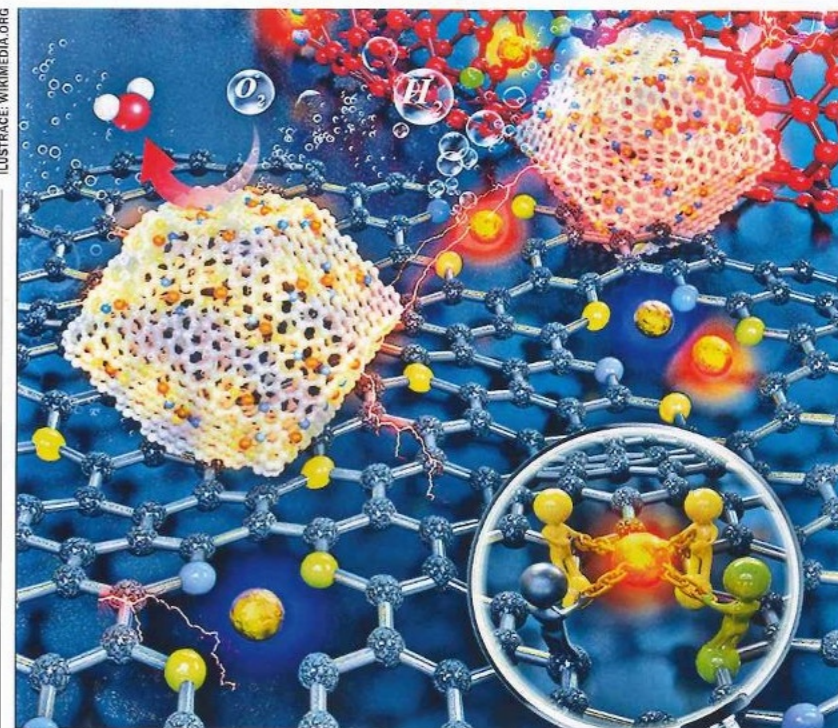


■ Ve vědecké části projektu sehraje hlavní roli problematika produkce vodíku solárním štěpením vody, elektrochemická přeměna odpadního oxidu uhličitého a zejména inženýrství na úrovni jednotlivých atomů.

ni rezistencí vůči antibiotikům,“ říká prof. Michal Otyepka, hlavní řešitel projektu z ústavu **CATRIN** Univerzity Palackého.

AŽ K ATOMŮM

Výzkumníci se rozhodli využít obrovského potenciálu metody atomárního inženýrství, které umožňuje řídit vlastnosti látek až na úrovni atomů. Vědci jsou schopni vnést jednotlivé atomy kovů do struktury různých materiálů, čímž dokážou výrazně zlepšit jejich vlastnosti, nebo dokonce objevit zcela nové možnosti uplatnění. „*Ukazuje se, že nanotechnologie začínají být překonány a ustupují právě atomárnímu inženýrství,*“ uvedl průkopník této metody, profesor **Radek Zbořil** z **CATRIN**, jehož tým se zaměří zejména na její využití v energetice, kde umí mnohonásobně zvýšit účinnost získávání zeleného vodíku pomocí solárního rozkladu vody nebo amoniaku. „*Také už víme, že materiály vyvinuté na bázi atomárního inženýrství dokážou zabít bakterie*



■ Autonomní nanoroboti se mohou stát budoucností cílené nádorové terapie a dalších aplikací.

„*Jsem nadšený, že dlouhodobá a skvělá spolupráce s nejlepšími skupinami v materiálových vědách vyústila ve společný vědecký projekt, který umožní posunout hranice nanosvěta a vědění. Těší mě, že projekt byl vyhodnocen jako druhý nejlepší v konkurenci téměř stovky žádostí.*“

prof. Martin Pumera

mnohem účinněji než mnohá antibiotika, přičemž bakterie si na tyto materiály neumějí vyvíjet rezistenci. Ekonomické, ekologické i zdravotní přínosy jsou tudíž obrovské.“

NOVÉ TYPY KATALYZÁTORŮ I NANOROBOTI PRO VYUŽITÍ V MEDICÍNĚ

I katalyzátory připravené cestou atomárního inženýrství přinášejí až o řády vyšší výtěžnost reakcí a současně nahrazují potřebu drahých či nedostupných surovin, jako je například zlato či platina. Podle dalšího z klíčových členů týmu, **Jiřího Čejky** z Přírodovědecké fakulty UK, je katalýza zásadní pro udržitelnost například při zpracování ropy, zemního plynu nebo biomasy, výrobě paliv, polymerů, léčiv nebo při ochraně životního prostředí. „*V rámci projektu **TECHSCALE** je naším hlavním cílem příprava nových typů katalyzátorů na bázi jednotlivých atomů kovů,*

kteří umístíme na různých nosičích, jako jsou třeba grafen nebo zeolity,“ řekl Čejka. Tyto katalyzátory budou vědci zkoumat v různých průmyslově důležitých reakcích, aby dosáhli zvýšení efektivity procesu, hlubšího pochopení funkce katalyzátoru a porozumění mechanismu reakce.

NANO LEPŠÍ NEŽ ANTIBIO...

Obrovským tématem je pak oblast medicíny, zvláště včasného odhalení a léčby nemocí. To bude mít na starosti výzkumný tým z brněnského CEITEC-VUT. „*Budeme vyvíjet atom za atomem, unikátní nanoroboty na bázi nanoarchitektury, kteří budou mít specifický design a budou schopni detekovat velice nízké koncentrace biomarkerů, což může výrazně zlepšit diagnostiku řady nemocí,*“ upřesnil aplikace v medicíně profesor **Martin Pumera** z CEITEC-VUT, analytický chemik, profesor VUT v Brně, odborně zaměřený především na výzkum

nanomateriálů a nanorobotů. Tito nanoroboti se budou navíc autonomně pohybovat v lidském těle a likvidovat zárodky chorob.

Jednotící linkou multioborového projektu je posouvání hranic nanosvěta a dosažení přesnosti při řízení vlastností až na úrovni jednotlivých atomů, ale i snaha o rychlé a bezpečné zavedení výsledků do praxe. „*Už během návrhu materiálů budeme brát v úvahu jejich bezpečnost a možné společenské dopady. Věřím, že významně přispějeme k boji s antibiotickou rezistencí, připravíme vysoce účinné senzory a vyvineme nové udržitelné energetické technologie,*“ dodává hlavní řešitel projektu **Otyepka**. Postupy atomárního inženýrství přinesou ekologické benefity i ekonomické úspory v řadě průmyslových oblastí. V neposlední řadě by měly podpořit přijetí nových technologií odbornou i laickou veřejností.

DUSIČNANY A AMONIAK

Čeští (moravští) chemici a vědci z projektu **TECHSCALE** mají za sebou už první společný výstup. Nedávno publikovali studii v prestižním časopise **ACS Applied Materials & Interfaces**, kde popsali významný krok na cestě k efektivnější a udržitelnější výrobě amoniaku. I na tomto výzkumu se spojili vědci z CEITEC Energy na Vysokém učení



technickém v Brně, CATRIN Univerzity Palackého v Olomouci a národního superpočítačového centra IT4Innovations na VŠB-TUO.

Při elektrochemické redukci dusičnanu na amoniak využili jako katalyzátor aktivovaný materiál na bázi kovově-organických sítí (MOF, z angl. *Metal-Organic Framework*). Právě tyto materiály se ukazují jako velmi vhodné pro zlepšení energetické náročnosti řady průmyslově významných reakcí, což vědci v tomto konkrétním případě prokázali jak teoretickými výpočty, tak experimentálně.

2% EMITENT OXIDU UHLIČITÉHO

Elektrochemická redukce dusičnanu na amoniak patří mezi nadějná řešení pro zvládnání výzev, vyvolaných rostoucí energetickou poptávkou a snahou snižovat negativní dopady na životní prostředí. Dusičnany, které se řadí mezi běžné znečišťující látky například ve vodách, mohou také sloužit jako vhodný zdroj dusíku při syntéze amoniaku. Amoniak je významným průmyslovým produktem, ale jeho výroba je velmi energeticky náročná, s přibližně dvouprocentním dopadem na celosvětové emise oxidu uhličitého. Vědci proto zaměřili pozornost na zkoumání nových elektrokatalytických materiálů, které dovedou přeměnu dusičnanu na amoniak urychlit.

„Kovově-organické sítě (MOF) jsou intenzivně studované materiály, které mají široké využití. Náš tým se zaměřil na schopnost MOF obsahujících železo katalyzovat elektrochemickou přeměnu dusičnanů na amoniak,“ uvedl jeden z autorů článku, prof. Michal Otyepka z olomoucké CATRIN a IT4Innovations.

SPOČÍTALA TO KAROLINA

Vědci z Brna pak ukázali, že studovaný katalyzátor dosahuje ohromující 90pro-



■ Superpočítač KAROLINA v Ostravě má 570x vyšší výkon než nejdražší Mac od Applu.

centní účinnosti a posouvá hranice v této oblasti elektrokatalýzy. „Objasnění mechanismu pomocí náročných počítačových simulací jsme prováděli na KAROLINĚ, v současnosti nejvýkonnějším superpočítači v ČR. Pochopení mechanismu totiž nabízí unikátní pohled, kte-

rý lze v budoucnu využít k dalšímu zlepšování této třídy katalyzátorů,“ dodal Michal Otyepka.

Práce jasně ukazuje, jak se vzájemně skvěle doplňují poznatky z experimentů a počítačových simulací. Integrace výpočetních a experimentálních přístupů je jedním z pilířů projektu TECHSCALE, jenž cílí na vývoj nových materiálů a přístupů, které výrazně posunou současné hranice výzkumu v oblasti nanomateriálů až k návrhu nových materiálů s atomovou přesností.

VÍC HLAV VÍC VÍ

„Díky skvěle fungující spolupráci jsme získali komplexní informace nejen o chování, ale zejména o dalším potenciálu tohoto materiálu. Jsou to důležitá zjištění pro efektivnější a šetrnější redukci odpadních dusičnanů na amoniak, ale otevírají také nové možnosti pro výzkumníky, kteří by chtěli upravit nebo povrchově modifikovat materiály k přípravě elektrokatalyzátorů pro další průmyslově významné katalytické reakce,“ zdůraznil Martin Pumera z CEITEC Energy v Brně, který tento výzkum vedl.

Publikace je také jedním z prvních výstupů projektu TECHSCALE, jenž získal finanční podporu téměř 500 milionů korun ve výzvě Špičkový výzkum operačního programu Jan Amos Komenský. ■

Univerzity reagují na společenské změny

Díky navýšení rozpočtu výzvy Špičkový výzkum na 12,2 miliardy korun získalo podporu celkem 26 projektů, které mají posílit pozici České republiky v evropském výzkumném prostoru a zvýšit konkurenceschopnost tuzemských výzkumných týmů s evropskou i světovou špičkou.

TECHSCALE získal druhé nejvyšší ohodnocení ze všech.

UNIVERZITA PALACKÉHO:

„Skutečnost, že ve výzvě naši vědci uspěli, je dokla-

dem excelence výzkumu, jemuž se aktuálně věnují. My všichni jsme svědky obrovského pokroku v mnoha odvětvích lidské činnosti, přesto je posun od nanotechnologií k atomárnímu inženýrství pro většinu z nás něčím z oblasti sci-fi,“ uvedl prorektor Univerzity Palackého pro internacionalizaci Jiří Stavovčík.

UNIVERZITA KARLOVA:

„Vysoké školy a jejich vědecké základny musejí pružně reagovat na neustálé změny, s nimiž se svět a naše společnost

potýkají. Je skvělé, že projekt odráží prioritní témata digitalizace, robotizace nebo klimatických či společenských změn. Vedle benefitů je třeba zdůraznit také zvyšování konkurenceschopnosti, kterou naši vědci svým bádáním získávají nejen ve svém oboru, ale svými výsledky jí pak přináší celé České republice,“ uvedla rektorka Univerzity Karlovy profesorka Milena Králíčková.

CEITEC-VUT:

Vývoj nanomateriálů je jednou z oblastí, kterou se

dlouhodobě zabývá i CEITEC-VUT. „Jsem proto hrdý, že se Martin Pumera a jeho tým připojili k projektu TECHSCALE, který se zaměřuje nejen na vědecký aspekt této oblasti, ale také na aspekt společenský. Věda dnes totiž není jen o práci v laboratoři, ale také o komunikaci výsledků a o diskuzích jejich celospolečenského dopadu. Věřím, že znalosti a zkušenosti Martina Pumery především v oblasti jednoatomárního inženýrství budou cenným přínosem pro projekt,“ uzavřel ředitel CEITEC VUT Radim Vrbka. ■

Nové možnosti úpravy vody? I to mohou nabídnout jednoatomové katalyzátory

Nové perspektivy v oblasti čištění vod s důrazem na udržitelnost prostředí představili autoři z CATRIN Univerzity Palackého, Centra energetických a environmentálních technologií VŠB-TUO a Texas A&M University v přehledovém článku v prestižním časopise *Chemical Society Reviews*, který na něj graficky upozorňuje i na svém přebalu.

je zásadní změnu v odstraňování stopových množství toxických látek s vysokou účinností. V pilotních aplikacích nebyl pozorován téměř žádný vliv chloridů, uhličitánů, fosfátů a přírodních organických látek, které by snižovaly účinnost SACs při likvidaci

Hlavní pozornost výzkumníci soustředili k využití metody inženýrství na úrovni jednotlivých atomů a jejímu srovnání s tradičními technologiemi úpravy vody.

V HLAVNÍ ROLI JEDEN ATOM

Pilotní aplikace jednoatomárních katalyzátorů (Single Atom Catalysts, SACs) v technologiích úpravy vody se objevily teprve nedávno. Přehledový článek, vypracovaný na základě pozvání editorů *Royal Society of Chemistry*, představuje využití SACs při aktivaci peroxidu vodíku a persulfátů k produkci reaktivních chemických forem, využitelných v procesech úpravy vody, a porovnává mechanismy těchto procesů s tradičními technologiemi čištění vod.

„Největším problémem současných technologií čištění vod je obtížné odstranění velmi nízkých množství některých polutantů, zejména v přítomnosti anorganických iontů a přírodní organické hmoty, které se obvykle ve vodě vyskytují v mnohem vyšších koncentracích,“ uvedl jeden z korespondujících autorů, Radek Zbořil z CATRIN Univerzity Palackého, který rovněž vede



■ Nový přístup na bázi atomárního inženýrství dovoluje několikanásobně zvýšit účinnost materiálů používaných pro fotokatalytickou a fotoelektrochemickou přeměnu sluneční energie na vodík.

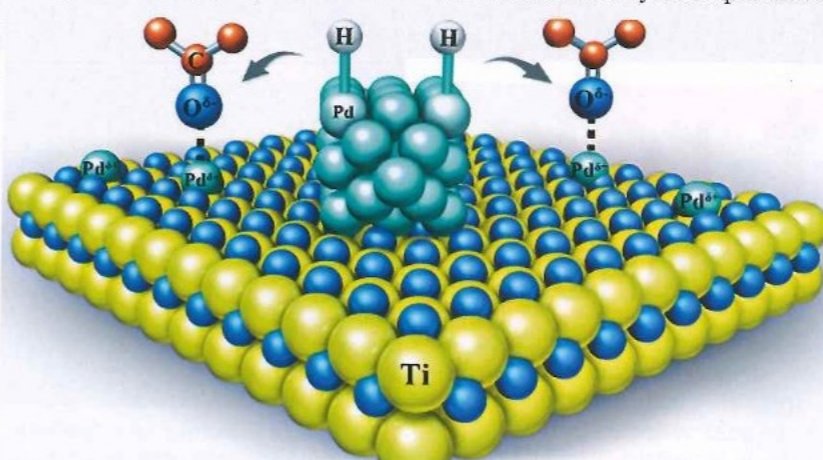
výzkumnou laboratoř v Centru energetických a environmentálních technologií VŠB-TUO.

ŘEŠENÍ PRO CELÝ SVĚT

Ukazuje se, že využití vhodných jednoatomárních katalyzátorů představu-

znečišťujících látek ve vodě. „To otevírá nové možnosti řešení celosvětového problému, jímž je narůstající nedostatek pitné vody a s tím související potřeba jejího opětovného využití,“ dodává Zbořil.

Autoři se ve studii zaměřují na porovnání účinnosti jednoatomárních katalyzátorů s tradičními oxidačními procesy. Kromě řady podobností v oblasti tvorby reaktivních radikálů dochází ke zjištění, že SACs s laditelným koordinačním okolím a valenčním stavem kovů mohou generovat výhradně neradikálové chemické formy, dovolující vysoce účinné čištění vody často ve velmi složitých chemických maticích. Právě vysoká účinnost SACs pro odstranění velmi toxických látek při současně eliminaci vlivu dalších složek obsažených ve vodě skýtá obrovský potenciál z hlediska vývoje nových udržitelných technologií čištění vod s velkým komerčním potenciálem. ■



■ Jednoatomové katalyzátory mají potenciál významně ovlivnit chemický a energetický průmysl a budoucnost lidstva.