Praha 13. března 2024

Cena Wernera von Siemense 2023: Nejvýznamnější výsledek základního výzkumu

Oceněný tým:

**RNDr. Tomáš Slanina, Ph.D.**

**Mgr. David Dunlop**

**Mgr. Lucie Ludvíková, Ph.D.**

Univerzita / vědecké pracoviště: **Akademie věd ČR , Ústav organické chemie a biochemie**

Název práce: **(Anti)Aromaticita excitovaných stavů vysvětluje proč azulen porušuje Kashovo pravidlo**

Tým chemiků z Akademie věd odhalil tajemství azulenu

Cenu Wernera von Siemense v kategorii Nejvýznamnější výsledek základního výzkumu získali RNDr. Tomáš Slanina, Ph.D., Mgr. David Dunlop a Mgr. Lucie Ludvíková, Ph.D., z Ústavu organické chemie a biochemie Akademie věd ČR za práci s názvem (Anti)Aromaticita v excitovaném stavu vysvětluje proč azulen porušuje Kashovo pravidlo.

Azulen provokuje zvědavost chemiků již řadu let. Na otázku, proč je modrý, ačkoliv by podle všeho být neměl, odpověděl před téměř padesáti lety český vědec světového významu prof. Josef Michl. Nyní jde v jeho stopách český tým, který svým kolegům v oboru předložil řešení této hádanky. Přesvědčivě popsal, proč azulen porušuje takřka univerzální Kashovo pravidlo, podle něhož molekuly vyzařují světlo pouze z nejnižšího, prvního excitovaného stavu. Azulen naopak toto pravidlo porušuje – vyzařuje světlo pouze z vyššího, druhého excitovaného stavu.

Pro vysvětlení chování azulenu použil tým Tomáše Slaniny koncept aromaticity. Aromatické molekuly se vyznačují tím, že jsou stabilní. Naopak antiaromatické molekuly jsou nestabilní a snaží se z tohoto stavu uniknout. Slaninův tým popsal chování azulenu v kombinované výpočetní a experimentální studii. Hlavní autor studie David Dunlop ve spolupráci s profesorem Henrikem Ottossonem ze švédské Uppsalské univerzity na základě detailní výpočetní studie vytvořili hypotézu, že azulen je antiaromatický v prvním excitovaném stavu, a naopak aromatický ve druhém excitovaném stavu. Tuto hypotézu experimentálně potvrdila Lucie Ludvíková pomocí ultrarychlé transientní spektroskopie. Antiaromatický první excitovaný stav azulenu je krátce žijící, neboť molekula nabývá destabilizující elektronovou strukturu a snaží se opět relaxovat do aromatického, základního stavu. Naopak aromatický druhý excitovaný stav je dlouho žijící a může vyzářit světlo.

**Koncept aromaticity o něco jasnější**

Práce je tak zásadním pokrokem v porozumění a využití konceptu aromaticity. Získané výsledky umožňují design nových anti-Kashovských molekul a nabízejí nástroje pro popis několika dosud známých. Nové poznatky současně poskytují návod, jak efektivněji ukládat světelnou energii do excitovaných stavů molekul, které budou aplikovány k designování fotocitlivých materiálů pro solární baterie.

„Pro mě bylo milým překvapením, jak velký mezinárodní ohlas tato studie získala. Kontaktovalo nás několik novinářů jak z tuzemských, tak zahraničních médií, gratulovala mi i spousta kolegů z různých zemí,“ říká vedoucí týmu Tomáš Slanina. Tehdy si uvědomil, že jejich článek dokázal zaujmout chemiky napříč obory, protože popisuje molekulu, která je součástí všech učebnic organické a fyzikální chemie, a proto každý chemik slyšel o jejím podivném chování. „Když mi tedy David Dunlop oznámil, že by rád studii přihlásil do soutěže, s radostí jsem jej v tom podpořil,“ dodává Tomáš Slanina.

**Elegantní závěr**

Podle Lucie Ludvíkové bylo na práci nejtěžší najít optimální experimentální podmínky, aby se podařilo získat dostatečně silný signál, který by bylo možné dobře vyhodnotit. „To mě vlastně i nejvíce bavilo – mám ráda náročné experimenty. Asi nejzajímavější mi připadá, jak krásně sedí výsledky experimentální s výpočetními a jak z toho pak vyplývá jednoduchý a elegantní závěr o antiaromaticitě jednotlivých stavů azulenu,“ vysvětluje.

O tom, že kolegové David Dunlop a Tomáš Slanina přihlásili jejich práci do soutěže o Cenu Wernera von Siemense, se dozvěděla až se zpožděním. „Myslím, že spěchali s podáním kvůli termínu a zapomněli se mi o tom zmínit. Já myslela, že podkladové dokumenty potřebují k podání grantu a dále jsem nad tím nespekulovala. O to větší překvapení a radost jsem měla z našeho úspěchu,“ směje se Lucie Ludvíková.

**Kontakt pro novináře:**

Siemens, s.r.o., Communications

Mariana Kellerová, telefon: +420 602 403 594

E-mail: [mariana.kellerova@siemens.com](mailto:mariana.kellerova@siemens.com)

Sledujte naše novinky na **X**: <https://x.com/SiemensCzech>

Připojte se k nám na **Facebooku**: <http://www.facebook.com/SiemensCzech>

**Siemens AG** (Berlín a Mnichov) je technologická společnost zaměřená na průmysl, infrastrukturu, dopravu a zdravotnictví. Siemens vytváří účelné technologie, které zákazníkům přinášejí skutečnou hodnotu: od továren účinněji využívajících zdroje, přes odolné dodavatelské řetězce a inteligentnější budovy a energetické sítě až po čistší a pohodlnější dopravu a pokročilou zdravotní péči. Propojením reálného a digitálního světa umožňuje Siemens svým zákazníkům transformovat jejich odvětví a trhy a pomáhá jim měnit každodenní život miliard lidí. Siemens je také držitelem většinového podílu ve veřejně obchodované společnosti Siemens Healthineers, která je předním světovým poskytovatelem zdravotnických technologií a utváří tak budoucnost zdravotní péče. Ve fiskálním roce 2023, který skončil 30. září 2023, dosáhla skupina Siemens celosvětově tržeb ve výši 77,8 miliard eur a čistého zisku 8,5 miliardy eur. K 30. září 2023 měla společnost po celém světě přibližně 320 000 zaměstnanců. Další informace jsou k dispozici na internetové adrese [www.siemens.com](http://www.siemens.com).

**Siemens Česká republika** patří mezi největší technologické firmy v České republice a již více než 130 let je nedílnou součástí českého průmyslu a zárukou inovativních a udržitelných technologií. Se svými více než 10,5 tisíci zaměstnanců se řadí mezi největší zaměstnavatele v Česku. Portfolio Siemens pokrývá řešení pro průmysl, distribuované energetické systémy, veřejnou infrastrukturu a technologie budov. Odděleně vedené společnosti Siemens Healthineers a Siemens Mobility a Innomotics působí na trhu energetiky, zdravotnických technologií, kolejové dopravy a pohonů. Český Siemens je průkopníkem v oblasti průmyslové digitalizace a automatizace a inteligentní infrastruktury, v jejichž rámci přináší zákazníkům komplexní digitální produkty a služby. Více informací: <http://www.siemens.cz>