**Tajemná modrá molekula pomůže lépe využívat světelnou energii**

19.9.2023

**Vědci z ÚOCHB jako první popisují příčiny chování jedné ze základních aromatických molekul, která vědecký svět fascinuje nejen svou modrou barvou, ale i dalšími neobvyklými vlastnostmi – azulenu. Tento jejich počin ovlivní do budoucna základy organické chemie a v praxi pomůže využít na maximum potenciál zachycené světelné energie. Článek publikoval časopis *Journal of the American Chemical Society* (JACS).**

Azulen provokuje zvědavost chemiků už řadu let. Na otázku, proč je modrý, ačkoliv by podle všeho být neměl, odpověděl před skoro padesáti lety vědec světového významu, shodou okolností úzce spjatý s Ústavem organické chemie a biochemie AV ČR (ÚOCHB), prof. Josef Michl. Nyní jde v jeho stopách Dr. Tomáš Slanina, aby svým kolegům v oboru nabídl řešení další hádanky. On a jeho kolegové totiž přesvědčivě popsali, proč drobná molekula azulenu porušuje takřka univerzální Kashovo pravidlo.

Toto pravidlo vysvětluje, jak molekuly vyzařují světlo poté, co se dostanou do různých excitovaných stavů. Pokud použijeme přirovnání ke stoupajícímu schodišti, pak první schod, tedy první excitovaný stav molekuly, je vysoký a každý následující schod je nižší, a tedy i blíž tomu předchozímu. Čím je vzdálenost mezi schody menší, tím rychleji má molekula tendenci ze schodu spadnout do nižších pater. Na prvním schodu pak čeká nejdéle, než se vrátí na základní úroveň, přičemž může vyzářit světlo. Azulen se ovšem chová jinak.

Aby vysvětlili chování azulenu, použili vědci z ÚOCHB koncept aromaticity. Opět jednoduše řečeno, aromatická látka se nevyznačuje vůní, ale tím, že je stabilní nebo chcete-li spokojená. Někteří chemici pro její neformální označení dokonce používají familiární emotikon usmívající se tváře. Antiaromatická látka je naopak nestabilní a molekula se z tohoto stavu snaží co nejrychleji uniknout, opouští vyšší patra a padá dolů. Azulen je na prvním schodu nespokojený, tedy antiaromatický, a proto v řádu pikosekund padá dolů bez toho, aby stihnul vyzářit světlo. Na druhém schodu se ale chová jako spokojená aromatická látka. A to je podstatné! V tomto excitovaném stavu zůstává klidně i celou nanosekundu, což je dost dlouhá doba na to, aby vyzářil světlo. Energie tohoto excitovaného stavu se tedy nikam neztrácí a mění se zcela ve vysoce energetický foton.

Slaninův tým svým výzkumem odpovídá na potřeby současné doby, která hledá způsob, jak zajistit, aby se energie z fotonů (např. ze Slunce), kterou molekula zachytí, neztrácela a aby ji bylo možné dál využít. Třeba k přenosu energie mezi molekulami nebo k separaci náboje v solárních článcích. Cílem je vytvářet molekuly, které se světelnou energií nakládají co nejefektivněji. V aktuálním článku navíc výzkumníci na mnoha případech ukazují, že vlastnost azulenu je přenositelná. Stačí jeho strukturu „přilepit“ k jakékoliv aromatické molekule a ta díky tomu dostane klíčové vlastnosti azulenu.

Tomáš Slanina k tomu dodává: „Mám rád teorie, které jsou tak jednoduché, že si je člověk může jednoduše představit, zapamatovat a pak používat. A přesně tohle se nám podařilo. Odpověděli jsme na otázku, proč se molekuly chovají určitým způsobem, a to na základě velmi jednoduchého konceptu.“

Badatelé z ÚOCHB využili ve svém výzkumu několik unikátních programů, které dokážou spočítat, jak se chovají elektrony v molekule v už zmíněných vyšších excitovaných stavech. O těchto stavech se obecně ví jen málo a práce je tedy průlomová i proto, že otevírá dveře k jejich dalšímu studiu. Článek zveřejněný ve vědecké publikaci JACS navíc není jen výpočetní, ale taky experimentální. Výzkumníci ze skupiny Tomáše Slaniny doprovodili data experimentem, který správnost vypočítaných údajů přesně potvrdil. Spolupracovali přitom i s jednou z největších světových kapacit v oboru (anti)aromatických molekul, prof. Henrikem Ottossonem z Uppsalské univerzity ve Švédsku. Tato spolupráce zaujala žurnál JACS už podruhé. Poprvé se bádání týkalo další základní molekuly – benzenu.

Příběh samotného azulenu je přitom ještě vrstevnatější. Dotýká se nejen fotochemie, ale třeba i medicíny. Stejně jako první oblast, nese i ta druhá pečeť pražského Ústavu organické chemie a biochemie. Jedno z prvních léčiv vyvinutých v jeho laboratořích je totiž mast, jejímž základem je heřmánkový olej obsahující právě derivát azulenu. Krabička s názvem dermazulen obsahující preparát s hojivými a protizánětlivými účinky jistě našla během dekád své pevné místo v nejedné lékárničce tuzemských domácností.

**Původní článek:** Dunlop, D.; Ludvíková, L.; Banerjee, A.; Ottosson, H.; Slanina, T. Excited-State (Anti)Aromaticity Explains Why Azulene Disobeys Kasha’s Rule. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**. <https://doi.org/10.1021/jacs.3c07625>

**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 medicinální 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.

--- KONEC TISKOVÉ ZPRÁVY ---

**KONTAKT PRO NOVINÁŘE:**

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

mob: +420 602 160 135