

Kation- π interakce

Ocenění Via Chimica pro Matěje Červenku

Cation- π interaction. Via Chimica award for Matěj Červenka

Jana Žďárská

Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 00 Praha 8; zdarskaj@fzu.cz

Od čtení genetické informace přes stabilitu buněčných membrán až po fungování receptorů v lidském mozku – za řadou klíčových procesů v živých organismech stojí kation- π interakce.

Tyto mezimolekulové síly jsou předmětem výzkumu Matěje Červenky z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR, který za svoji práci získal studentskou cenu Via Chimica.

Cena Via Chimica je určena studentům bakalářských a magisterských chemických oborů. Vyhláší ji společně Učená společnost České republiky a Nadace Experientia, které jejím prostřednictvím oceňují mladé chemické talenty. Do soutěže mohou studenti přihlásit odborný článek, bakalářskou práci, studentskou práci nebo studii vytvořenou výhradně pro účely ceny. Porota hodnotí nejen originalitu studentské výzkumné práce, ale také schopnost srozumitelně představit výsledky výzkumu jak odborné, tak širší veřejnosti.

Nadace Experientia má zajímavou historii. Založili ji manželé Dalimil Dvořák, působící na Vysoké škole chemicko-technologické v Praze, a Hana Dvořáková, která spolupracovala v Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR s Antonínem Holým na vývoji antivirových látek. Laureát ceny Via Chimica získává finanční odměnu ve výši 50 000 Kč.

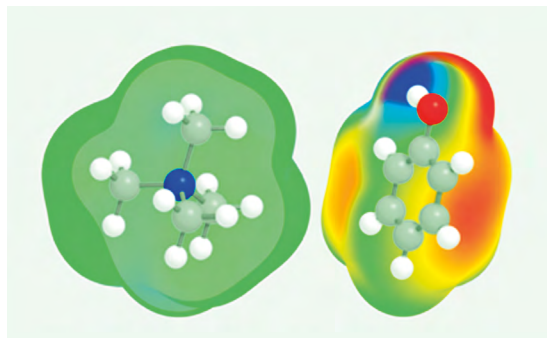
Za rok 2025 získal studentskou cenu Via Chimica Matěj Červenka za nejlepší studentskou práci v celém oboru chemie. „Nejvíce mě těší svoboda přemýšlet, zkoušet nové postupy a hledat souvislosti, které nejsou na první pohled zřejmé,“ vysvětluje svoje nadšení pro základní chemický výzkum ve fyzikální chemii autor. „Vědecká práce má v tomto smyslu i velmi tvořivý rozměr. Člověk si s nápady do jisté míry hraje, ovšem



Foto: Archiv nadace Experientia, Barbora Mráčková

s oporou v chemické intuici, fyzikálních principech a experimentálních datech. Velká část objevů vzniká právě tak, že zkoušíme různé cesty, testujeme hypotézy a občas narazíme na něco nečekaného, co před námi nikdo nepopsal. To je na vědě nesmírně fascinující.“

Matěj Červenka se věnuje především teoretickému popisu a molekulárnímu modelování kation- π interakcí, zejména s ohledem na jejich využití v biomolekulárních simulacích. Vyvíjené modely propojují s experimenty neutronové difrakce, které s atomovým rozlišením odhalují strukturu vodných roztoků obsahujících systémy založené na těchto interakcích. Výsledky simulací tak může přímo porovnávat s experimentálními daty. „Kation- π interakce jsou přitažlivé síly mezi kladně nabitými částicemi, tedy kationty, a molekulami s π -elektronovým systémem, jaký mají například benzen nebo toluen,“ přibližuje svůj výzkum Matěj Červenka. „Už samotný název tedy poměrně dobře napovídá, o co jde. Kationty i π -elektronové systémy jsou v živých organismech velmi rozšířené, a proto se tyto interakce podílejí na celé řadě biologických procesů. Ovlivňují například správné sbalení a funkci proteinů nebo molekulové rozpoznávání, díky němuž se



Obr. 1 Mapa elektrostatického potenciálu na povrchu molekul – tetramethylamonný kation (vlevo) a fenol (vpravo).

Matěj Červenka (*2003) pochází z Prahy. Po absolvování Gymnázia Jana Keplera nastoupil na VŠCHT Praha, kde studuje chemii. Zároveň působí na Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR ve skupině prof. Pavla Jungwirtha. Ve své vědecké práci se pohybuje na pomezí fyzikální a výpočetní chemie a propojuje molekulové simulace s experimenty, především s neutronovou difrakcí.

Zaměřuje se zejména na kation- π interakce ve vodném prostředí a jejich význam pro biologicky relevantní systémy. Tyto mezimolekulové interakce hrají důležitou roli například ve struktuře a funkci proteinů, v molekulovém rozpoznávání nebo při vazbě neurotransmiterů a léčiv. Jako první autor publikoval práci věnovanou biologicky relevantním kation- π interakcím ve vodě v časopise *Journal of Physical Chemistry B*. Jeho výsledky mohou přispět ke zpřesnění biomolekulárních simulací a najít uplatnění například při vývoji nových léčiv.

Na svém kontě má již několik vědeckých publikací, připravuje další rukopisy a věnuje se i dalším projektům, mimo jiné výzkumu kovové vody. Za svou práci získal Cenu Via Chimica, která oceňuje mimořádné studentské výsledky v chemii. Voda se přitom v jeho životě objevuje i mimo vědu: zatímco v laboratoři a simulacích ji studuje na úrovni atomů a molekul, ve volném čase ji nejraději poznává z jiné perspektivy – na hladině při windsurfingu.

jednotlivé molekuly v organismu dokážou vzájemně najít a navázat na sebe. Důležitou roli hrají také při působení neurotransmiteru acetylcholinu a stojí mimo jiné za tím, proč se nikotin tak dobře váže na své receptory a může vyvolávat závislost.“

Takto vytvořené modely a získané poznatky mohou sloužit jako důležitý a cenný nástroj pro studium biologických procesů, identifikaci nových terapeutických cílů a vývoj inovativních léčiv. Zároveň umožňují hledání odpovědí na důležité biologické otázky. „Vývoj léků dnes stále více spoléhá na výpočetní metody, tedy takzvané *in silico* návrh léčiv. Aby však tyto metody byly skutečně spolehlivé, musejí umět přesně popsat i slabé, ale biologicky velmi důležité interakce mezi léčivem a cílovou biomolekulou. V našem výzkumu se nám podařilo modelovat kation- π interakce v biomolekulárním kon-

textu s velmi vysokou přesností. Vědecké komunitě tím dáváme do rukou nástroj, který může zpřesnit simulace vazby léčiv na proteiny a receptory a pomoci tak už v raných fázích vývoje vybrat slibné molekuly a vyřadit ty méně vhodné. To může celý proces vývoje nových léčiv urychlit a zefektivnit,“ připomíná Matěj Červenka.

Při tomto výzkumu jsou využívány pokročilé výpočetní metody, které umožňují simulovat chování molekul s atomární přesností. Díky nim mohou vědci předpovídat vlastnosti molekul a jejich vzájemné interakce ještě předtím, než je ověří experimentálně. „Výpočetní chemii lze zjednodušeně popsat jako chemii prováděnou v počítači. Donedávna šlo často především o zpřesňování metod tak, aby co nejlépe souhlasily s experimentálními výsledky. Moderní výpočetní chemie se však stále více snaží jít ještě o krok dál: nejen experimenty vysvětlovat, ale také jejich výsledky s vysokou přesností předpovídat ještě předtím, než jsou provedeny. O něco podobného jsme se pokusili v naší nedávné práci a mohu říci, že dosud nepublikovaná data z neutronové difrakce velmi dobře souhlasí s predikcemi z této studie. To považuji za důležitý a úspěšný krok vpřed, protože ukazuje, že výpočetní chemie může být nejen nástrojem pro interpretaci experimentů, ale i pro jejich spolehlivé předpovídání,“ dodává Matěj Červenka.

Matěj Červenka se chtěl fyzikou zabývat již od dětství. Na gymnázium se poté více přiklonil k chemii a nakonec se začal věnovat výzkumu ve fyzikální chemii. Obě tyto cesty se tímto způsobem propojily. „Na Gymnázium Jana Keplera jsme měli skvělého a velmi zapáleného chemikáře PaedDr. Vladimíra Šmahaje, který ve mně probudil lásku k chemii a nechával nás trochu si „hrát“ ve školní laboratoři,“ připomíná Matěj Červenka. „Jednou jsme se spolužáky, podobnými nadšenci do chemie, narazili na to, že ze sodíku a draslíku, tedy kovů, které jsou při pokojové teplotě pevné, se dá připravit kapalná slitina. Vypadá trochu jako rtuť, ale na vzduchu hoří a s vodou reaguje opravdu prudce. Pan Šmahaj nás pak nasměroval na Phila Masona, který nám ukázal, jak se s takovou látkou dá pracovat bezpečně a seriózně.“



Obr. 2 „Nejvíce mě těší svoboda přemýšlet, zkoušet nové postupy a hledat souvislosti, které nejsou na první pohled zřejmé,“ vysvětluje svoje badatelské nadšení Matěj Červenka. Foto: Archiv nadace Experientia, Barbora Mráčková



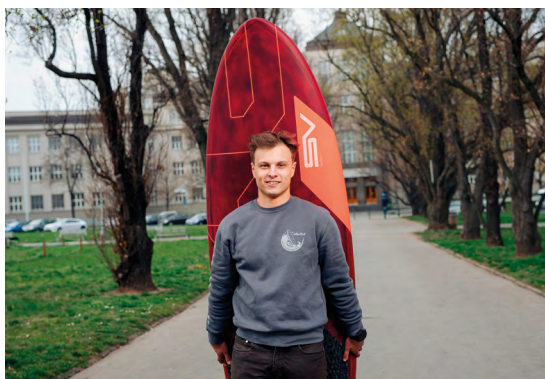
Obr. 3 Molekulární modely ověřuje Matěj Červenka pomocí experimentů neutronové difrakce, které umožňují nahlédnout do světa molekul s atomovou přesností. Foto: Archiv nadace Experientia, Barbora Mráčková

Tato zkušenost byla pro Matěje Červenku velmi důležitá a k chemii ho ještě více přitáhla. Dostal možnost, kterou si vždycky přál – tedy pracovat ve vědě. Další úžasnou příležitostí na počátku jeho badatelské cesty je možnost zapojit se do výzkumu s Philem Masonem a Pavlem Jungwirthem, špičkovými vědci, kteří stojí například i za objevem „kovové vody“. Možnost být součástí takového výzkumu byla pro Matěje Červenku velkou motivací a zároveň potvrzením, že se vydal správným směrem. To prokázala i skutečnost, že ve svých 21 letech publikoval článek v časopise *Journal of Physical Chemistry B*. „Byl to pro mě určitý milník, kdy jsem měl pocit, že jsem do vědy skutečně vstoupil. Je něco jiného, když si člověk s nápady zatím spíše hraje, a něco jiného, když se mu podaří narazit na zajímavý výsledek, který pak musí systematicky prozkoumat, ověřit, vysvětlit a dovést až do podoby finální publikace. Publikovat prvoautorský článek už ve 21 letech pro mě byla velmi důležitá zkušenost a zároveň velká motivace do další práce,“ podotýká Matěj Červenka.

Když jsem si prohlížela fotografie z předání ceny Via Chimica, zaujala mě fotografie s windsurferem-

vým prknem. V duchu jsem si říkala, jakým způsobem souvisí s výzkumem a fyzikální chemií. Rozuzlení ovšem přišlo záhy – to když jsem se zeptala, jak Matěj Červenka nejraději odpočívá a zda je pro něj odpočinek důležitý: „*Nejraději odpočívám sportem, hlavně windsurfigem,*“ zněla poměrně jasně odpověď. „*Člověk si při tom mentálně odpočine od vědy, nechá za sebou počítač i všechny rovnice a soustředí se jen na vítr, vodu a plachtu. Je zajímavé, že právě když hlava na chvíli přestane problém vědomě řešit, často se do ní po surfování vrátí nové nápady. Jako by je vítr trochu pročistil, srovnal správným směrem a člověk pak najednou vidí věci jasněji.*“ To mohu potvrdit i já, vášnivá cyklistka. Když se mi s nějakým článkem příliš nedaří nebo si lámu hlavu nad jeho dobrým názvem, stačí sednout na kolo – s větrem ve vlasech (nyní spíše pod přilbou) a cestou tu inspiraci jistojistě potkám. Jen mám vždy problém se zapisováním svých nápadů. Činím tak do mobilu a už jsem si nejednou vyslechla na svoji adresu hlášky typu, že ti dnešní cyklisté nedokážou vydržet bez mobilu ani na kole... Příště se zeptám Matěje, jak si při windsurfigu zapisuje nápady on.

Ocenění Via Chimica je pro Matěje Červenku jistě uznáním dosavadní práce. Zároveň však naznačuje, že o jeho výzkumu ještě uslyšíme. Přestože zkoumá děje odehrávající se na atomární úrovni, jejich význam může v budoucnu přesáhnout hranice základního výzkumu a najít uplatnění v medicíně i biotechnologiích. „*Rád bych dále prohluboval naše porozumění mezimolekulovým interakcím na biomolekulární úrovni,*“ připomíná své plány do budoucna Matěj Červenka. „*Zároveň bych se chtěl zaměřit na těsnější propojení výpočetní chemie a biologie, protože právě tam vidím velký potenciál pro zodpovídání důležitých biologických otázek i pro vývoj nových léčiv. Cílem je, aby výpočetní metody dokázaly stále přesněji popsat, předpovídat a vysvětlovat procesy, které jsou pro fungování živých systémů zásadní.*“



Obr. 4 Když zavře počítač, bere do ruky plachtu. Windsurfing je pro Matěje Červenku nejlepší odpočinek i zdroj nové inspirace. Foto: Archiv nadace Experientia, Barbora Mráčková