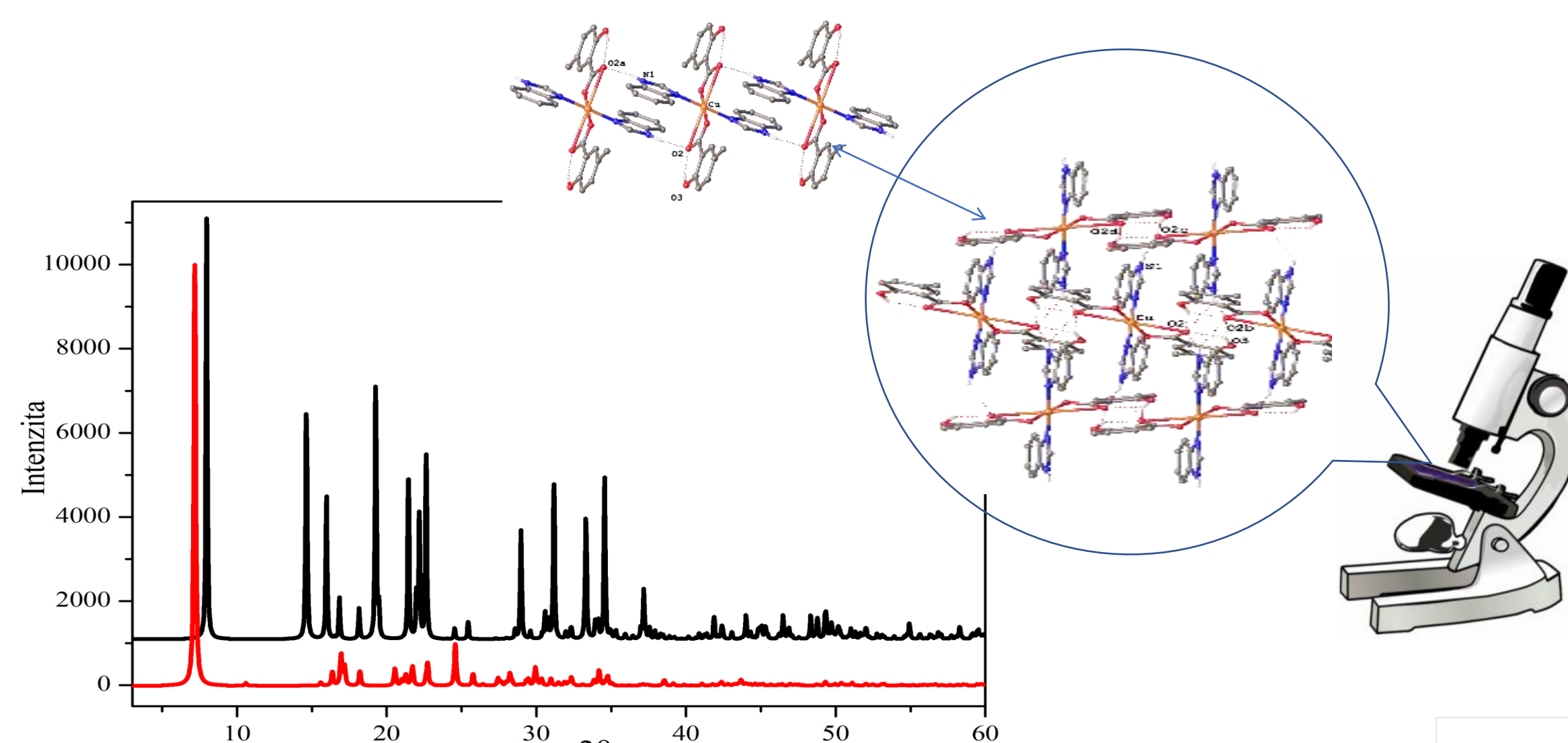


Čomu sa venujeme?

➤ Štruktúra a stabilita tuhých látok, supramolekulová chémia

Významnou oblasťou výskumu na našom oddelení je štúdium štruktúrnych aspektov anorganických zlúčenín, biokoordinačných zlúčenín a anorganických materiálov metódami monokryštálovej a práškovej RTG analýzy. Poznanie štruktúry predstavuje dôležitú informáciu pre ďalšie bádanie. Štruktúra a vlastnosti komplexov prechodných prvkov s biologicky významnými ligandmi či štúdium vzťahov medzi štruktúrou a vlastnosťami veľkých viacjadrových koordinačných supramolekúl s finálnym cieľom jemne ladiť štruktúru komplexov patrí medzi hlavné oblasti bádania v tuhej fáze, s čím úzko súvisí aj skúmanie polymorfných zlúčenín či potenciálnych katalyzátorov uplatňujúcich sa aj v organickej syntéze.

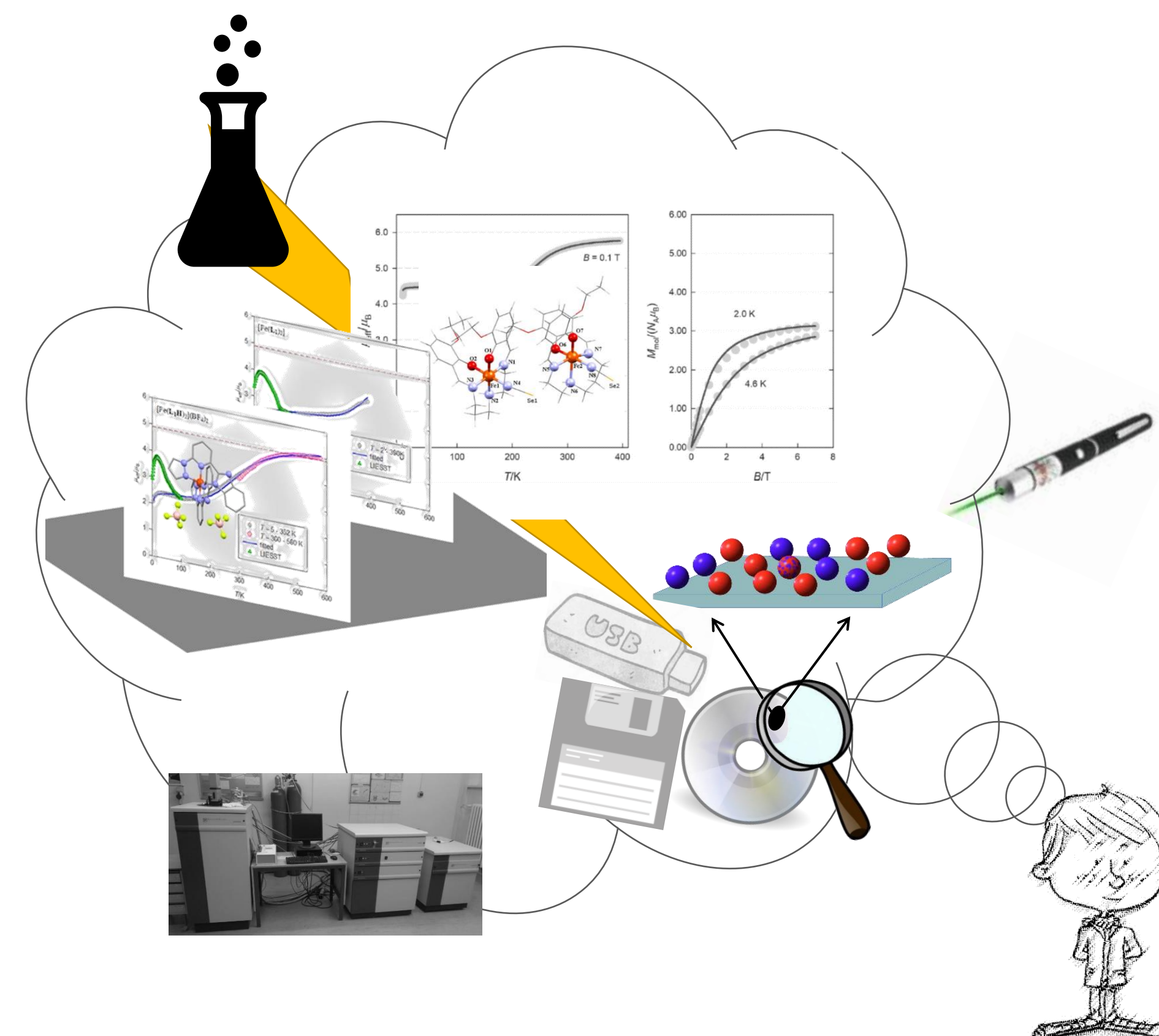
Prášková RTG analýza nám poskytuje možnosť riešenia štruktúry z polykryštallických vzoriek ale aj určenie fázovej čistoty porovnaním experimentálnych a simulovaných difrakčných záznamov komplexov s vyriešenou kryštálovou štruktúrou, čo v tuhej fáze napomáha odlíšiť zmesi a čisté látky.



Monokryštálová vs. prášková röntgenoštruktúrna analýza

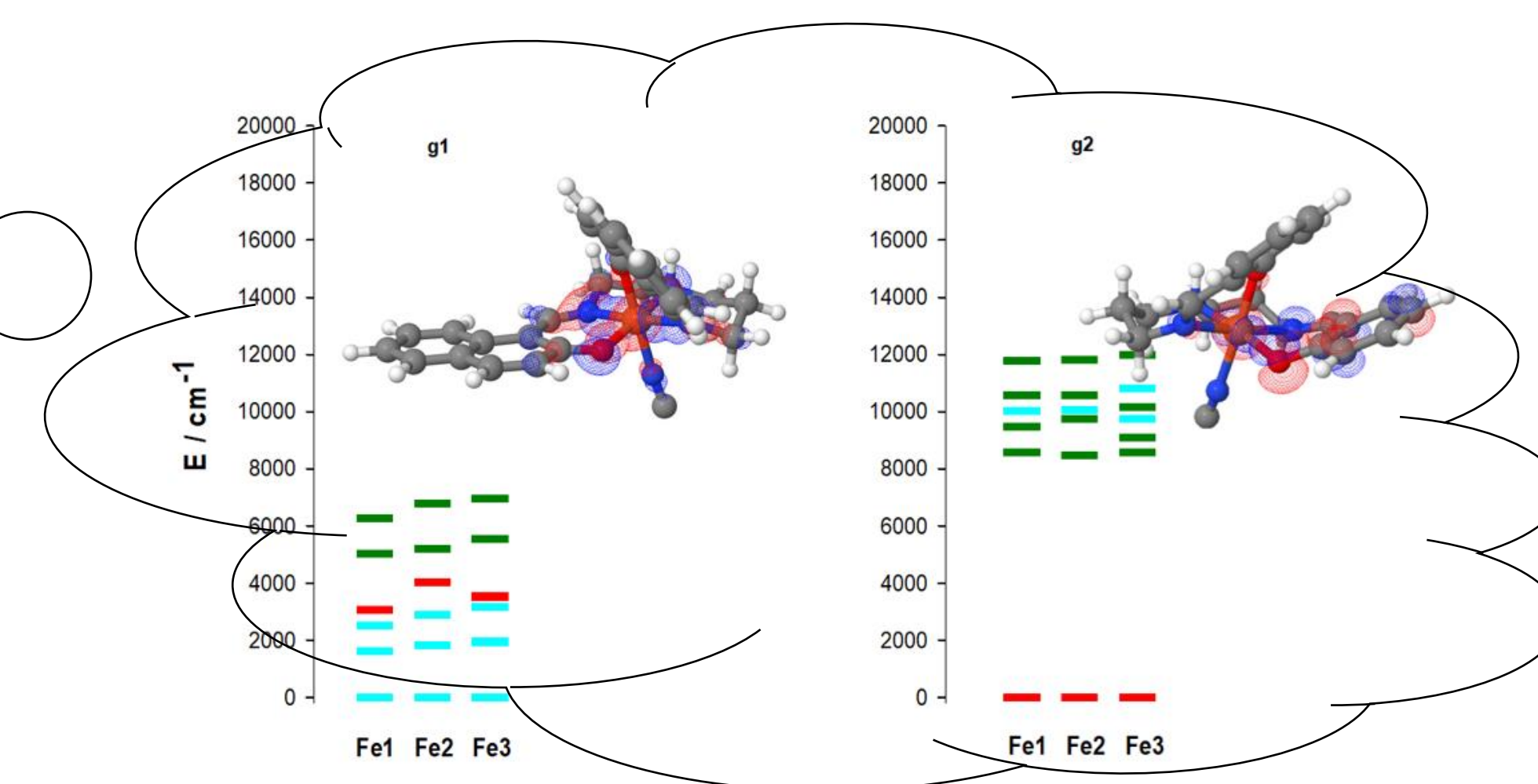
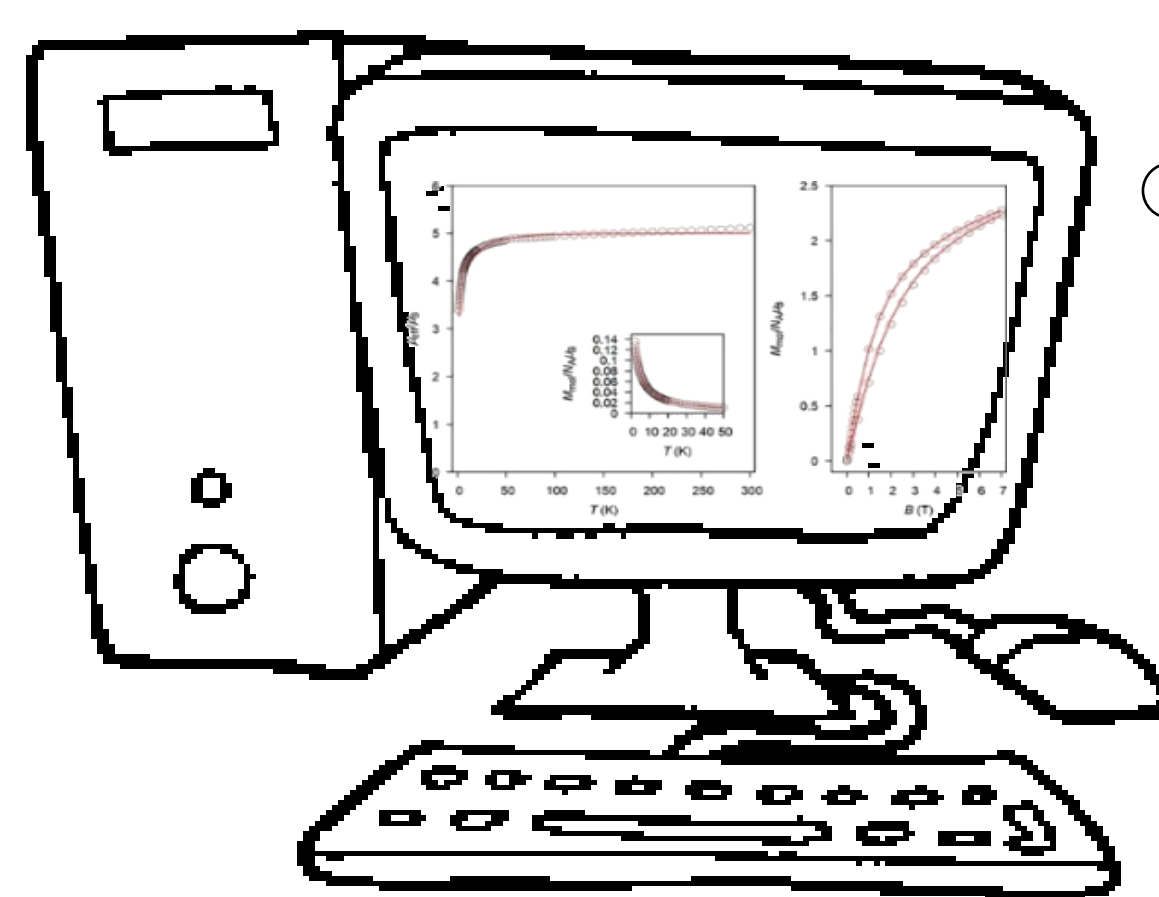
➤ Magnetizmus

Racionálny molekulový dizajn a syntéza nám umožňujú pripravovať koordinačné zlúčeniny s laditeľnými magnetickými vlastnosťami – spin crossover systémy a jednomolekulové magnety. V takýchto látkach možno prepínať magnetické stavy zmenou teploty, magnetickým poľom alebo svetlom. Ich vlastnosti študujeme aj pomocou spektroskopických techník a interpretujeme pomocou teoretických prístupov (napr. DFT a Monte Carlo). Ciele nášho výskumu spočívajú vo vývoji aplikačne atraktívnych zlúčenín a z nich pripravených hybridných materiálov (nanočastice, povrchy) vykazujúcich bi- alebo multistabilitu magnetických stavov pri bežných podmienkach, ktoré je možné využiť ako vysokokapacitné pamäťové nosiče, displeje, kontrastné látky pre MRI a pod.



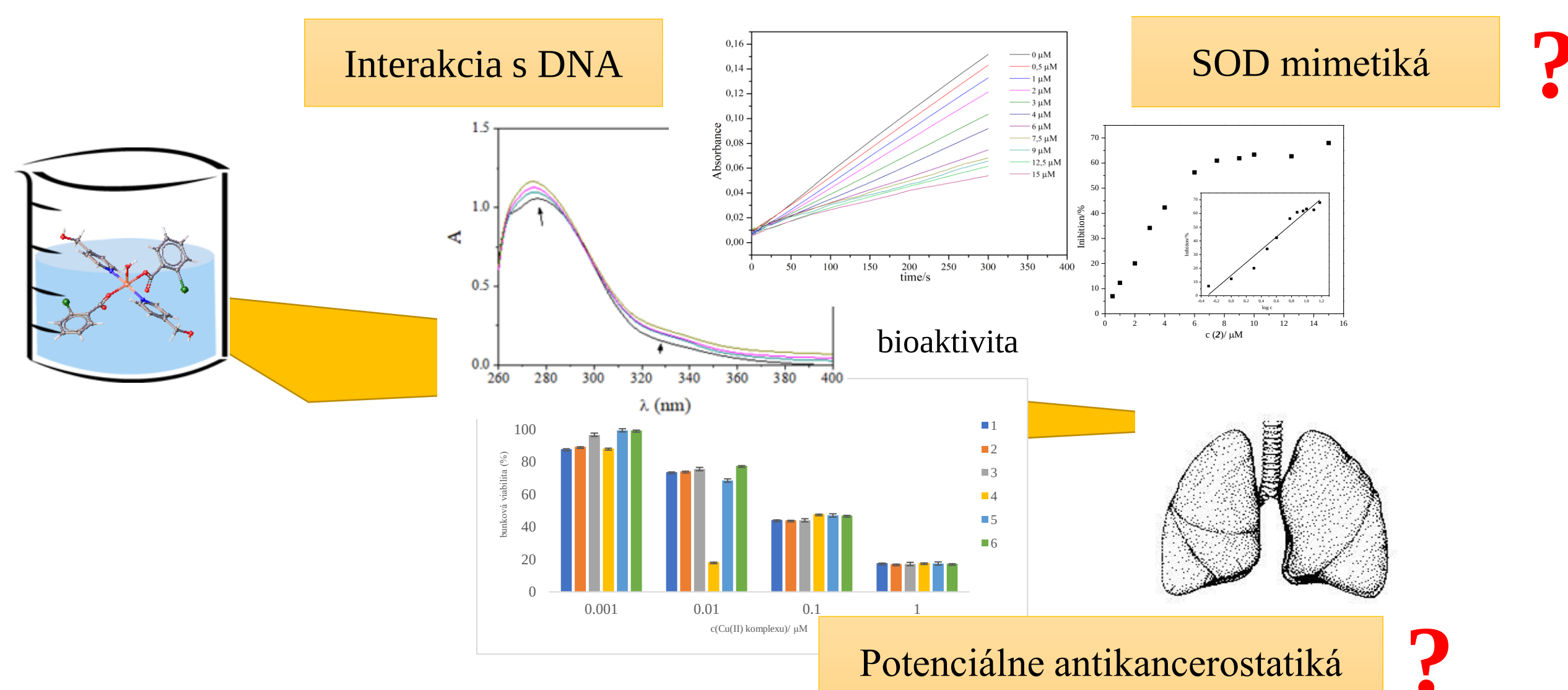
➤ Počítačová chémia

V teoretickom výskume sa zameriavame na hlbšie pochopenie elektrónovej štruktúry molekúl a z nej vyplývajúcich fundamentálnych magnetických javov - výmenné interakcie, magnetická anizotropia, kooperativita, termochromizmus a fotoaktívita spin crossover materiálov - pomocou teoretických prístupov ako DFT, post-HF alebo Monte Carlo. Okrem magnetických javov výpočtové metódy prispievajú aj k pochopeniu spektrálnych vlastností študovaných látok (infračervené a Ramanove spektrá, UV-vis, NMR a pod.)



➤ Koordinačné zlúčeniny a ich potenciálna bioaktivita

Jednou z veľkých výziev koordinačnej chémie ako vednej disciplíny je priblížiť akademický výskum komplexov k ich potenciálnej aplikácii. Príkladom je štúdium biologickej aktivity pripravených nízkomolekulových zlúčenín, ktoré by mohli nájsť využitie v medicínskej oblasti ako terapeutiká. V snahe nájsť koordinačné zlúčeniny interagujúce s DNA ako aj napodobniť správanie sa natívnych enzýmov, konkrétne superoxiddismutázy (SOD) a katechol oxidázy (CO), pripravujeme komplexy prechodných kovov Cu, Ni, Co, Mn, Pd a Ru s biologicky aktívnymi dusíkatými ligandmi ako sú Schiffove bázy a deriváty imidazolu a pyridínu. Pripravené komplexy charakterizujeme analytickými a spektrálnymi metódami ako aj magnetickými a difrakčnými metódami. V prípade vybraných komplexov študujeme ich interakcie s DNA a mimetickú aktivitu spolu s elektrochemickým správaním, ktoré rovnako poskytuje informácie o priebehu biologickej dôležitých redoxných dejov.



➤ Fotochémia, roztoková chémia a nanočastice

Cieľom tejto vetvy nášho výskumu je štúdium zloženia roztokov komplexov kovov najmä s biologicky aktívnymi ligandmi, ich fotochemických a katalytických vlastností a štúdium chemických zmien koordinačných zlúčenín vplyvom UV a viditeľného žiarenia.

V oblasti nanočastíc sa venujeme príprave ich rôznych modifikovaných, ktoré sa môžu využiť v environmentálnych aplikáciách, či už ako mikromotory na odstraňovanie polutantov alebo v senzoch na detekciu vírusov, či rôznych iných zaujímavých látok.

