



Priopćenje za javnost

Petra Buljević Zdjelarević
Institut Ruđer Bošković, Ured za odnose s javnošću
Tel.: +385 (1) 457-1269, (99) 267-95-14, (99) 312-66-06
E-mail: info@irb.hr

Zagreb, 19.listopada 2012.

Novi uspjeh "Ruđerovaca" - ponovno među TOP5

'Ruđerovci' dr. Kovačević i dr. Vianello objavili revijski rad u TOP5 časopisu Chemical Reviews

Znanstvenici Grupe za kvantnu organsku kemiju Instituta Ruđer Bošković (IRB) dr. sc. Borislav Kovačević i dr. sc. Robert Vianello objavili su, zajedno s pok. prof. Zvonimirom Maksićem, revijski rad u Chemical Reviewsu, najprestižnijem časopisu u kemiji i petom svjetskom časopisu po faktoru utjecaja (IF = 40.197), u kojem su prikazali svoja postignuća u zadnjih deset godina u području računalne kemije jednog od tri stupa nositelja prirodnih znanosti.

Istraživanje dr. Kovačevića i dr. Vianella odnosi se na razumijevanje reakcija prijenosa protona te računalnog predviđanja novih naprednih materijala, posebice izuzetno snažnih organskih superbaza i superkiselina. Razumijevanje reakcija prijenosa protona, najmanjih, najlakših i najrasprostranjenijih atomskih jezgri u svemiru, od izuzetne je važnosti za kemiju jer procesi prihvatanja i otpuštanja protona utjelovljuju najelementarnije kemijske reakcije, a često predstavljaju i početni korak mnogih organskih i biokemijskih transformacija.

S druge strane, razvoj novih i sve snažnijih organskih superbaza, spojeva koji se često nazivaju protonskim spužvama zbog njihove sposobnosti "upijanja" protona i poticanja kemijske transformacije bez neželjenih popratnih reakcija i suvišnih tvari, doprinosi svim granama kemijske industrije iz jednostavnog razloga što superbaze predstavljaju važne i nezamjenjive katalizatore u mnogim kemijskim pretvorbama.

Rad pod naslovom „Advances in Determining the Absolute Proton Affinities of Neutral Organic Molecules in the Gas Phase and Their Interpretation: A Theoretical Account“ objavljen je na poziv glavnog urednika, a stigao je kao priznanje višegodišnjim istraživanjima članova ove grupe pod vodstvom pok. prof. Zvonimira Maksića. U posljednjih desetak godina, znanstvenici Grupe za kvantnu organsku kemiju objavili su u ovom području oko četrdesetak radova u vodećim časopisima za kemiju. Ostvarili su mnogobrojne suradnje i na taj način eksperimentalno potvrdili svoja računalna predviđanja kroz zajednički rad s grupama unutar IRB-a, ali i u inozemstvu.

"Ovaj revijski rad priznanje je kontinuiranim vrhunskim rezultatima koje smo u zadnjih desetak godina postigli u području računalne kemije. On nas pozicionira kao jednu od vodećih svjetskih grupa u ovom području te predstavlja vjetar u leđa i putokaz da je ovo jedan od smjerova kojim trebamo snažno nastaviti i u budućnosti. U isto vrijeme, ovo priznanje pruža poticaj i odskočnu dasku znanstvenicima u malim zemljama da svojim trudom i angažmanom nadoknade smanjena ulaganja u znanost i infrastrukturne zaostatke te uhvate priključak s vodećima u svijetu." izjavio je dr. Vianello.

Računalna kemija danas je jedan od glavnih putova istraživanja u računalnim prirodnim znanostima. Uklonila je „granice“ između tradicionalnih disciplina fizike, kemije i molekularne biologije pružajući važnu vezu između teorije i eksperimenata te se danas smatra trećim stupom modernih prirodnih znanosti.

PRIOPĆENJE – DODATNE INFORMACIJE

Dr. sc. Robert Vianello

<http://www.irb.hr/Ljudi/Robert-Vianello>

BIOGRAFIJA

Robert Vianello rođen je 1977. godine u Rijeci. Studirao je kemiju na Sveučilištu u Zagrebu gdje je diplomirao 2000. godine i doktorirao 2003. godine. Na Institutu Ruđer Bošković zaposlen je od 2000. godine. Dobitnik je brojnih nagrada i priznanja, 2010. godine dobio je nagradu „Perspektivnog znanstvenika“ koju mu je dodijelio Centra za primijenjenu kvantnu mehaniku iz Pariza (Francuska) i prestižnu stipendiju Marie Curie koju mu je dodijelila Europska komisija. Njegov projekt FP7 projekt „Computational Studies of Proton Dynamics in Hydrogen Bonded Systems and Enzymes“ odabran je kao "Marie Curie uspješna priča" u publikaciji Europske komisije "EU FP7 People Specific Programme Success Stories Booklet" gdje su predstavljene 23 odabrane individualne stipendije. Autor je 42 znanstvena rada.

KONTAKT:

dr. sc. Robert Vianello, viši znanstveni suradnik

Email: Robert.Vianello@irb.hr

Telefon: +385 1 456 1117

Laboratorij: Grupa za kvantnu organsku kemiju

Zavod: Zavod za organsku kemiju i biokemiju

Dr. sc. Borislav Kovačević

<http://www.irb.hr/Ljudi/Borislav-Kovacevic>

BIOGRAFIJA

Borislav Kovačević rođen je 1970. godine u Sisku. Diplomirao je kemiju na Sveučilištu u Zagrebu 1995. godine. Iste godine pridružio se grupi prof. Maksića na IRB-u gdje je doktorirao računalnu kemiju 2001. godine. Za svoj rad na teorijskoj studiji bazičnosti organskih spojeva i dizajna novih superbaza dobio je Državnu nagradu za znanstvene novake i mlade znanstvenike (2003) te Nagradu "Lavoslav Ružička" Hrvatskog kemijskog društva (2004). Autor je 38 znanstvenih radova.

KONTAKT:

dr. sc. Borislav Kovačević, viši znanstveni suradnik

Email: Borislav.Kovacevic@irb.hr

Telefon: +385 1 456 1117

Laboratorij: Grupa za kvantnu organsku kemiju

Zavod: Zavod za organsku kemiju i biokemiju

POK. PROF. DR. SC: ZVONIMIR MAKSIĆ – BIOGRAFIJA:

Područja istraživanja u kojima je profesor Maksić ostvario značajne rezultate obuhvaćaju molekularnu fiziku, teorijsku i računalnu kemiju. Bavio se modeliranjem hibridizacije u molekulama, problemom elektronske korelacije u kvantnoj kemiji, prirodom kemijske veze, kemijom kiselina i baza, dizajnom novih molekula ciljanih svojstava, što su samo neke od tema u središtu njegovog interesa. Osnivač je Grupe za kvantnu organsku kemiju na Institutu Ruđer Bošković. Uveo je u našu sredinu metode moderne kvantne kemije, koje je uspješno primjenjivao na rješavanje problema elektronske strukture molekula.

Dobitnik je više važnih nagrada i priznanja: Nagrada grada Zagreba za izvanredna dostignuća u znanosti za 1976. godinu, Republička nagrada 'Ruđer Bošković' za znanstveni rad iz 1987., Medalja Kemijskog odsjeka PMF-a za 2005., Državna nagrada za životno djelo u području prirodnih znanosti za 2008., plaketa „za njegov pionirski doprinos u razumijevanju kemijske veze“ u povodu uglednog Charles A. Coulson predavanja koje je održao u Athensu na Sveučilištu Georgia 2008. godine

Tijekom svoje impresivne 48-godišnje znanstvene karijere, profesor Maksić objavio je preko 250 izvornih znanstvenih članaka, 23 revijska članka i poglavlja u monografijama, koji su citirani preko 3500 puta. Objavio je 250 znanstvenih (CC) radova i 23 revijska članka, koji su u literaturi citirani preko 3500 puta. Uključen je u međunarodnu suradnju kroz veliki broj projekata. Urednik je svjetski priznate serije knjiga 'Teorijski modeli kemijske veze', Springer, Heidelberg, 1991-92, kao i su-urednik velike serije knjiga 'Teorijska i kompjuterska kemija', Elsevier, Amsterdam, 1994 – do danas. Bio je promotor pri dodjeli počasnog doktorata honoris causa dvostrukom nobelovcu Linusu Paulingu 1988. godine. Organizirao je u Cavtatu svjetski poznat simpozij o strukturi molekula s učešćem nobelovaca L. Paulinga i K. Fukui-a, koji je rezultirao značajnom Cavtatskom deklaracijom o očuvanju života na Zemlji. Višestruko je boravio kao gostujući profesor na sveučilištima u Heidelbergu, Münsteru i Essenu, te na Universidad Autonoma u Madridu. Učestvovao je u radu redakcija četiriju međunarodnih CC časopisa. Za svoj znanstveni rad primio je Nagradu grada Zagreba 1976. godine i državnu nagradu za znanost Ruđer Bošković 1987. godine. Održao je glasnogovornički predavanje Charles Coulson predavni na Kemijskom odsjeku Sveučilišta Georgia, Athens, U.S.A. Tom prilikom primio je u znak priznanja plaketu «za doprinose razumijevanju kemijske veze» 2008. godine.

Dugačka lista publikacija profesora Maksića u istaknutim svjetskim časopisima svjedoči o znanstvenoj izvrsnosti te predanom i kontinuiranom radu. Za takvu predanost potrebna je istinska strast i znanstvena znatiželja, koje ga nisu napuštale do posljednjih dana života.

OBJAŠNENJE POJMOVA:

Vodikova veza je privlačno elektrostatsko međudjelovanje atoma vodika i nekog elektronegativnog atoma (npr. dušika, kisika ili fluora) koji dolazi iz druge molekule ili kemijske skupine. Ova vrsta veze javlja se kod anorganskih molekula poput vode i organskih molekula kao što su DNK (nukleinska kiselina u obliku dvostruke, spiralno zavijene zavojnice koja sadrži genetičke odrednice za specifični biološki razvoj staničnih oblika života i većine virusa) i protein (ili bjelančevine koji su sastavni su dijelovi svake stanice koja čini osnovu života na Zemlji).

Jedna od najčešćih upotreba superkiselina je u pružanju okoline za kreiranje i održavanje organskih kationa (pozitivno nabijenih iona tj. električki nabijenih atoma ili skupina atoma) koji su korisni kao posredničke molekule u brojnim reakcijama, npr. onim u plastici ili u proizvodnji i proučavanju visokotokanskog benzina.

Proton je najmanja, najlakša i najrasprostranjenija atomska jezgra u svemiru. Unatoč svojoj maloj veličini igra ogromnu ulogu u kemiji, biokemiji i molekularnoj biologiji.

Računalna kemija danas je jedan od glavnih puteva istraživanja u računalnoj prirodnoj znanosti. Uklonila je „granice“ između tradicionalnih disciplina fizike, kemije i molekularne biologije pružajući važnu vezu između teorije i eksperimenata. Danas se računalna kemija smatra trećim stupom moderne prirodne znanosti.

Korisne poveznice:

Link na rad u časopisu: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/cr100458v>

BACKGROUND: <http://danas.net.hr/znanost/uspjeh-dvojca-s-rudjera>