

LIDOVÉ NOVINY

Díky milionu eur Jiří Klimeš vybuduje tým, který vyvíjí chytré metody pro přesnější simulace materiálů, hlavně pak molekulárních krystalů. Metoda je zajímavá i pro farmacii a materiálové vědy.

PRAHA Je mladý, skromný, ale opakovaně už získává prestižní ocenění – a velmi ceněné granty.

Jiří Klimeš odcházel do světa v roce 2007 s „červeným diplomem“ z Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy. Zabýval se chemickou fyzikou. I proto, že se líbila Anglie, kam vyjížděl s pěveckým sborem, si vybral doktorské studium na University College London (UCL), kde se pod vedením Angelose Michaelidese věnoval přesnému popisu procesů na povrchích materiálů.

Jela s ním i manželka Eva, optička, jež zase zamířila na Imperial College. Klimeš dostal v roce 2010 cenu za nejlepší chemickou publikaci na UCL, po návratu do Česka pak stipendium Marie Curie-Sklodowské (2015) a také nový startovací grant Primus, který udílí Univerzita Karlova velmi nadějným vědcům. Těm, kteří mohou dosáhnout na štědré granty Evropské výzkumné rady (ERC).

A to se teď Klimešovi podařilo. Před pár dny dostal potvrzení, že získal 920 tisíc mu eur čili 24 milionů korun! „Je to na pětiletý výzkum. Budu mít dva doktorandy, dva postdoky a peníze na výpočetní klastr,“ řekl LN Klimeš, jenž si do týmu vybral studenta z Ukrajiny a postdoktorandku z Číny. Výzkum započne 1. ledna 2018.

Vypočítat nevypočítatelné

„Můj projekt je zaměřen na vývoj metod pro počítačové simulace materiálů, především molekulárních krystalů. Typickým molekulárním krystal je vodní led. Zajímavé je, že voda může krystalizovat v dalších alespoň patnácti fázích, v závislosti na tlaku a teplotě. Vazebné energie těchto různých fází se přitom liší jen málo. Vypočítat přesně tyto malé rozdíly je velmi obtížné; v principu totiž potřebujeme vyřešit Schrödingerovu rovnici pro celý krystal. Toto ale není možné a musíme popis systémů zjednodušit, to pak ale ovlivní kvalitu naší předpovědi,“ vysvětluje svůj velice teoretický záměr. „Hlavním cílem projektu je vyvinout přístup, který bude jak velmi přesný, tak jím bude možné vypočítat vazebnou energii pro celý krystal. Takovýto přístup chceme vyvinout pomocí unikátní kombinace metod kvantové chemie s metodami používanými pro popis pevných látek,“ doplňuje mladý autor třiceti vědeckých studií. Po vědcích, byť i těch, kteří se věnují základnímu výzkumu, se čím dál častěji vyžaduje odpověď na otázku: k čemu nám to bude?

Klimesh předpokládá dvojí aplikace: tzv. fázové diagramy a polymorfismus, aby bylo možné jednak dělat důvěryhodné předpovědi pro chování různých látek za tlaků nedosažitelných experimentálně (například pro pochopení složení pláště Neptunu a Uranu), jednak přesně vypočítávat vazebné energie látek – například léčiv.

Metody nejen pro farmacii

„Metody, na jejichž vývoji jsem se podílel, se hojně využívají pro studium různých materiálů a systémů. Od molekulárních krystalů, jako jsou léčiva, přes fázová rozhraní, třeba pro fotovoltaiku nebo senzory, až po pevné látky, jako jsou materiály pro baterie. V projektu se budeme snažit vyvinout přesnější a spolehlivější metody,“ říká Klimesh, jenž přiznává, že netušil, zda komise ERC podpoří grant, který neslibuje „vědecký průlom“, ale vylepšení metodiky.

Na pohovor v Bruselu se výtečně připravil: čerpal z kombinace svých znalostí v oblasti kvantové chemie a „pevnolátkařských“ metod, jež se naučil u Michaelidese (držitele dvou ERC grantů) během svého doktorátu v Londýně a Georga Kresseho ve Vídni – superhvězdy se 130 tisíci citacemi a Hirschovým indexem v enormní výši 94! „V cizině jsem toho získal hrozně moc,“ říká rodák z Broumova a dvojnásobný otec.

Než si Klimeše proklepli hodnotitelé ERC, chystal si cvičné interview s kolegy z pražského matfyzu, s dřívějšími držiteli těchto prvotřídních grantů i na semináři Technologického centra Akademie věd. A uspěl. „Je to potvrzení kvality nadějných mladých vědců, kteří získali zkušenosti u vynikajících osobností v zahraničí. Myslím, že Jiří nebude poslední,“ řekl LN profesor Zdeněk Strakoš z Univerzity Karlovy a hodnotitel ERC ke stále ještě v Česku tak výjimečnému úspěchu. Týž startovní grant přineslo do tuzemska za deset let jenom deset vědců, naposledy Ioni fyzička Jana Kalbáčová Vejpravová, jež nyní také bádá na Matematickofyzikální fakultě UK v Praze.

Vídeň, Curych, Turín... Praha?

Jiří Klimeš publikuje v kvalitních chemických i fyzikálních časopisech (Journal of Chemical Physics, Physical Review B, ACS Nano), kde se budou v dalších letech zřejmě objevovat i jeho nové studie. Na matfyzu učí „kvantovku“, což je, jak říká, užitečné pro ujasnění si fundamentů oboru. A pokud se bude výzkumu dařit, mohla by se Praha v dané specializaci zařadit k nemnoha světovým centrům: k Vídni, Curychu, Turínu a kalifornskému Riverside.

Jiří Klimeš (34 let) – kvantový fyzik

* S vyznamenáním vystudoval magisterský obor chemická fyzika na Matematicko-fyzikální fakultě Univerzity Karlovy (2007). * Posléze pokračoval na University College London, kde získal doktorát z chemie (Ph. D., květen 2011). * Jako takzvaný postdok pracoval v Londýně a následně na Vídeňské univerzitě (do května 2014). * Grant Marie Curie-Sklodowské řešil v Ústavu fyzikální chemie

Jaroslava Heyrovského v Akademii věd ČR (do března 2017). * Od ledna 2015 působí jako výzkumník na Univerzitě Karlově, kde učí také kvantovou fyziku. * Je autorem asi třiceti studií s více než 3400 vědeckými citacemi (H-index s hodnotou 19). * Žije s manželkou Evou, optičkou z centra Extreme Light Infrastructure (ELI) v Dolních Břežanech. * Vychovávají spolu syna a dceru.

Zdroj: Lidové noviny
Autor: Martin Rychlík