

Milí čtenáři,

dostává se vám do rukou speciální narozeninové číslo Chemických listů. Důvody vzniku tohoto čísla jsou dvojí: jednak tímto chceme pográtulovat Zdeňku Havlasovi – významnému českému (či jak by mě Zdeněk sám rád opravil – československému) teoretickému chemikovi a dlouholetému řediteli Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR a dále chceme využít této vzácné příležitosti a pro českou chemickou komunitu shrnout současný stav poznání v rozličných oblastech teoretické a kvantové chemie či molekulového modelování. Myslím, že málokterý chemik dnes pochybuje o významu teoretické a kvantové chemie pro úroveň našeho poznání a dovolil bych si tvrdit, že teorie je téměř integrální součástí současného chemického výzkumu. V některých případech je přesnost výpočtů a kvalita použitých modelů na takové úrovni, že dosahuje přesnosti dat experimentálních. A je to právě má pevná víra v pevný svazek teorie a experimentu, která mě vedla k tomu, že jsem oslovil redakci Chemických listů s myšlenkou věnovat jedno jejich číslo Zdeňku Havlasovi a teoretické chemii (s důrazem na její propojení s experimentem). Bylo mi pak ctí a velmi milou povinností oslovit několik mých kolegů – a Zdeňkových přátel – v regionu sahajícím „od Šumavy až k Tatrám“ či přesněji z Prahy přes Olomouc až do Bratislavy, se žádostí o příspěvek. Ještě milejší bylo zjištění, že většina z nich ráda přislíbila pomoc při sepisování tohoto čísla a své příspěvky včas dodala. Výsledek právě leží před vámi. Příspěvky v tomto čísle jsou řazeny v tom pořadí, v jakém došly do redakce, a pokrývají velkou část rozsáhlého oboru, kterým dnes teoretická chemie je. Lze se tak dočíst o možném využití solární energie v referátu Josefa Michla, nových materiálech jako je fluorografen (Radek Zbořil, Michal Otyepka a spol.) či fullerenových architekturách (Michal Straka a Petr Bouř). Pavel Jungwirth nám vysvětlí, proč sodík vybuchuje ve vodě, Pavel Hobza pak principy halogenové, chalkogenové a pniktogenové vazby, a Robert Ponec pak rozebere, jak lze popsat složitý útvar nazývaný N-elektronová vlnová funkce řečí chemikovi srozumitelnou. Petr Slaviček a kolektiv upozorní na opomíjenou roli kvantových jaderných efektů v chemii v referátu s téměř detektivním názvem „Ve stínu elektronů“, zatímco Jiří Vondrášek a Jiří Vymětal se zabývají rolí teoretické chemie a modelování při studiu konformačního prostoru aminokyselin. Velmi hezký a osobní příspěvek Ivana Čerňáka, Miroslava Urbana, Vladimíra Kellö a Jozefa Nogy pojednávající o studiu chemické reaktivity na pozadí (plátně) vývoje bratislavské kvantové chemie (či vývoje bratislavské kvantové chemie v kontextu studia chemické reaktivity?) nám připomíná společné federální časy a vřelý vztah mezi českou a slovenskou teoretickou chemií. Konečně autor tohoto úvodníku se spolu se svými spolupracovníky a kolegy snažil podat přehled o současném stavu v teoretické bioorganické

chemii a spektroskopii. Toto úvodní slovo bych rád zakončil poděkováním Rudolfovi Zahradníkovi za hezké a osobní „laudatio“.

Vše nejlepší, Zdeňku.

Lubomír Rulišek, editor speciálního čísla

Oslavenec Zdeněk Havlas



Moje blízcí se devadesátka mne věru neznepokojuje. Naproti tomu se mi příliš nelíbí, že někdejší mládenci z naší laboratoře jsou nyní mezi 60 až 80; někteří tu osmdesátka už dokonce překonali.

Když přišla před lety z oblasti blízké F. Šormovi zpráva, že by v ústavu rádi měli teoreticky orientovaného chemika, nebylo mi to proti mysli; z toho ústavu chodili jen lidé kvalifikovaní. Domluvili jsme si schůzku a ten nováček, Zdeněk Havlas se jmenoval, přišel na minutu přesně v doprovodu dvou seniorů z ÚOCHB. Rozhovor probíhal věcně, rychle a příjemně. Ten hovor vlastně do dneška neskončil. A třeba dodat, že probíhá už 40 let ve stejném užitečném a produktivním duchu. Už v průběhu rozhovoru jsem si uvědomil, že jde o mladého (nadšeného) chemika se širokým rozhledem v chemii s dobrou znalostí fyziky a matematiky. A pak jsme hovořili o tom, jaké by mělo být jeho zaměření po dobu jeho aspirantury – tak se tenkrát říkalo doktorandskému studiu.

Zanedlouho jsem se se Zdeňkem sešel a stvořili jsme program nejen pro první rok aspirantury. Chystali jsme se na studium chemické reaktivity, mechanismů chemických přeměn (rychlostních i rovnovážných stavů) metodami numerické kvantové chemie a statistické termodynamiky.

Zdeňkovo studium šlo rychle a zdárně vpřed, a tak po nedlouhé době jsme se začali domlouvat o možném tématu jeho disertace. I tato část jeho doktorandského studia měla – díky Zdeňkově pracovitosti a produktivitě – rychlý spád.

V roce 1979 předložil disertaci nadepsanou „Kvantově-chemické výpočty složek nukleových kyselin“. Po zdárně obhajobě nastal čas sepisování několika publikací a pak došlo k pěknému závěru rozšiřování jeho obzorů v podobě ročního pobytu na Cornellově univerzitě u Roalda Hoffmanna. V tu dobu už bylo pár let zřejmé, že jako opravdový badatel nesnese povrchnost, že musí porozumět důkladně a do hloubky. To je ostatně jedna z konstant pohybu na jeho životní badatelské trajektorii.

Nezkrotná badatelská vášeň provází Zdeňka po celý život. Kritický čtenář těchto řádek si může říci „no a co ...“, takových je u nás i ve světě! To je pravda, avšak důvod, proč na to hledím už léta s upřímným obdivem, je trochu jiný. Na rozdíl od nás, méně šikovných badatelů, Zdeňk navíc postavil vlastníma rukama podle plánů architektem ovlivněných velký patrový rodinný dům, zvelebil zahradu a – mimo mnohé jiné – za víkend opakovaně dokázal porazit pěkné prasátko, které vypiplal od malička, plus vše, co patří k profesionální zabijačce.

Vím, že laudatií k 65tinám Zdeňka Havlase bude více, a tak se úmyslně vyhnu charakterizaci toho, co se mi na

jednotlivých jeho výzkumných příbězích líbí obzvláště. Zdeňk pracuje trvale s velkou houževnatostí a je věru pěkné, že nežije jen z toho, co se naučil a co si osvojil před 40, 30, 20 či 10 lety, ale trvale má chuť, ochotu, způsobilost a elán se učit často dočista náročné – věci nové. K těmto názorům na oslavence se hlásím ve vhodných souvislostech už léta. Závěrem připouštím, že během či na konci rozpravy mi partneři v té debatě říkají něco jako „to souhlasí, ale holt je nemilé, že tak zdatný člověk byl členem té, pro demokraty tak odpudivé organizace“. To je pravda, která mne však netrápí proto, že bližní, s nimiž se setkávám, posuzují podle činů, které spáchali v minulosti a podle činů, které s nimi spojují v současnosti. V případě Zdeňka Havlase jde za uplynulých čtyřicet let o činy výlučně dobré a spravedlivé.

Je dobře dodat a je to povzbudivé, že kolega tak velice zaměstnaný je dobrým partnerem v debatách, týkajících se širokého okruhu témat, včetně témat literárních a kulturních. Imponuje mi, že přes všechny vysilující aktivity je Zdeňk Havlas člověk usměvavý a vlídný. Vážení kolegové, kteří se na něho obracejí s rozmanitými požadavky a přáními, často ne právě jednoduchými, téměř nikdy neodchází s prázdnou. Kéž takovým zůstane mnohá léta.

Rudolf Zahradník