



Text: Jana Olivová | Foto: Pavlína Jáchimová

Chceme-li osvětlit ničení ozonu v atmosféře, poškození DNA v lidském těle nebo vznik organických sloučenin ve vesmíru, musíme jít až k samé podstatě chemických procesů. Podle **Michala Fárníka z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR** je nejprve potřeba detailně poznat reakce mezi jednotlivými molekulami i dění přímo v molekule, která pohltí částici záření nebo se srazí s elektronem.

Hrátky mezi molekulami

■ Věnujete se základním otázkám fyziky a chemie na molekulové úrovni, jelikož mohou poskytnout odpovědi na mnoho praktičtějších otázek. Čím přesně se zabýváte?

Například molekulami v atmosféře, které mají nějaký význam pro atmosférickou chemii. Naším dlouho oblíbeným tématem je ozonová díra. Zkoumáme proto například interakci určitých molekul s UV fotony nebo elektrony na ledových nanočásticích. Tyto procesy jsou důležité v atmosféře. Stejným způsobem ale můžeme studovat též pochody, které se podílejí i na ničení biomolekul v těle. Podobné přístupy se dají aplikovat na vznik složitějších molekul ve vesmíru. Další oblastí, do níž jsme v poslední době náš výzkum rozvinuli, jsou nanotechnologie. Sice se jimi nezabýváme přímo, ale v technologických procesech se opět děje něco s molekulami. Mnohé technologické postupy jsou vlastně tak trochu empirie, nějakým způsobem se vyzkoušely a fungují, ačkoli jim v principu nemusíme rozumět. Ovšem vždycky, když přírodě porozumíme, dá se této znalosti využít k nějakému zlepšení. A to je náš cíl.

■ Akademická prémie svědčí o tom, že váš výzkum je mimořádný, v čem je odlišný od jiných podobných?

Zabýváme se především klastry, což jsou soubory molekul – mohou být dvě, ale také tisíc, nebo dokonce desetitisíce. Je to omezený systém, a když chcete studovat chemii na molekulární úrovni, je výhodnější než systém makroskopický. Ten totiž obsahuje molekul nesmírně mnoho, takže jakmile dojde k nějakému procesu, na něj naváže další, sekundární – a jde to stále dál a dál. Vidíte ale jenom začátek (víte, jaké reaktanty jste dala do reakce) a pak úplný konec, který je ovšem výsledkem spousty dějů probíhajících jeden po druhém na molekulární úrovni. Právě ty nás zajímají. Na jedné straně se lze odpoutat od makroskopického systému, vzít si jenom dvě molekuly a třeba je srazit mezi sebou a dívat se, jak probíhá reakce jen mezi těmi dvěma izolovanými molekulami. Tím se získá velice detailní pohled na probíhající pochody. Ale na druhé straně chemická reakce jako celek je určená i okolím, ostatní molekuly také hrají roli. Takže omezit se jen na dvě molekuly také nestačí, abychom dostali odpovědi na všechny otázky. Ideální je proto systém, který už obsahuje nějaké okolí, a přitom je ještě natolik malý, že mu můžete porozumět na molekulární úrovni. Takový je náš přístup: vezmeme nějakou molekulu a obklopíme ji molekulami vody, čímž vlastně simulujeme molekulu v biologickém prostředí. Pak tam pustíme volný elektron – právě k tomu dochází v lidském těle vystaveném energetickému záření – a zkoumáme na molekulové úrovni, co se děje. Nejde o přístup úplně nový, neboť malé systémy zvané klastry (můžeme jim rovněž říkat nanočástice nebo v atmosférické chemii aerosoly či aerosolové částice) se samozřejmě studují dlouho.

■ V čem jsou tedy postupy nebo přístroje, které ke svým výzkumům používáte, nové?

Podařilo se nám v posledních několika letech v Ústavu fyzikální chemie AV ČR soustředit celou řadu experimentů, které samy o sobě sice existují různé po světě, ale nikde nejsou

koncentrované na jedné aparatuře. Jakmile chcete porovnávat například výsledky pokusů z fotochemie a z pokusů se záchytem elektronů, problémem je, pokud se oba experimenty provádějí na různých aparaturách (např. v USA a v Číně) – pak vyvstává otázka, jestli byly experimentální podmínky shodné a zda se skutečně pracovalo se stejnými klastry. Výhodou naší aparatury je, že děláme různé experimenty s jedním molekulovým paprskem a jejich výsledky lze pak přímo srovnávat. Víme, že nanočástice, ony klastry, s nimiž jsme pracovali, byly ve všech experimentech stejně jednoduše proto, že jsou z jediného zdroje. Tím je naše aparatura světově unikátní. Navíc se v posledním roce naše výzkumná skupina rozrostla o další experimenty, které přivezli kolegové ze zahraničí. Umožňují nám výzkumy komplementární k těm, které provozujeme na hlavní aparatuře, a tudíž nám dovolují podívat se na zkoumané systémy ještě z jiných úhlů.

■ Zmínil jste termín „molekulové paprsky“, co si pod tím může laik představit?

Už někdy v 60. letech minulého století začali chemici pracovat s molekulovými paprsky, které vytváříme tzv. supersonickou expanzí. Prostě vezmete nějaké molekuly v plynné fázi a tryskou je posíláte do vakua. Ve vakuu není nic, je to prázdný prostor a při průchodu molekul z vyššího tlaku do vakua tryskou, která má v našem případě průměr asi 100 mikrometrů, se molekuly spojují, vytvářejí klastry a potom letí ve vakuu jedním směrem. Tomu se říká molekulový paprsek, přičemž mezi jednotlivými molekulami nebo klastry jsou takové vzdálenosti, že na sebe nijak nepůsobí. Neboli dostáváme izolované klastry či izolované molekuly ve vakuu, mezi nimiž není nic, takže s ničím neinteragují. Potom s nimi můžeme experimentovat: kupříkladu na ně posadíme další molekulu, poté k celému systému pošleme třeba UV foton nebo elektron a sledujeme, co se děje.

■ Uvedl jste, že sledujete mj. základní děje probíhající v atmosféře při ničení ozonu a zvětšování ozonové díry. Co konkrétně se vám už podařilo zjistit a co ještě budete zkoumat?

Asi každý ví, že ozonová díra vzniká nad Antarktidou a že nějak souvisí s freony. Freony se v přírodě normálně nevyskytují, byly vytvořeny uměle a začaly se vyrábět průmyslově jako chladiva atd. Když ale freony způsobují ozonovou díru, proč ji máme nad Antarktidou, ale není nad průmyslovými oblastmi, kde se freony vyráběly? Ukazuje se, že pochody, které vedou ke vzniku ozonové díry, jsou poměrně složité, reakcí je hodně, ale klíčovou roli hraje heterogenní chemie odehrávající se na povrchu ledových částic v tzv. polárních stratosférických mracích. Ty se vytvářejí, jak už název říká, ve stratosféře. Tam se vyskytuje ozon, o nějž nám jde, a tam se také ozon ničí. Ve stratosféře ale není mraků mnoho, je tam nízká vlhkost. Molekuly vody proto zkondenzují pouze v extrémně chladných oblastech. Z toho důvodu je ozonová díra nad Antarktidou. Přesně to jsme schopni v naší laboratoři zkoumat, poněvadž dokážeme

vytvořit ledové nanočástice, na ně si posadíme třeba molekulu freonu a pošleme tam UV foton. Neboli stimulujeme právě ten proces, k němuž dochází nahoře ve stratosféře, když do ní dopadají fotony slunečního záření. Zajímá nás mimo jiné, co se stane, když bude molekula freonu posazená na ledovou nanočástici: jestli se uvolní například atom chloru, radikál chloru – neboť právě tento atom vede k reakcím, které ničí ozon. Při jednom z experimentů jsme zjistili, že když molekuly freonu sedí na ledové nanočástici, orientují se tak, že atom chloru směřuje do ledu a po disociaci (čili poté, co se působením fotonu daná molekula rozbije) se chlorový radikál z dané ledové částice neuvolní. Nemohu tedy říct, že zkoumáme přímo ozonovou díru, protože reakcí s ní spojených je velká řada. My se však snažíme studovat na elementární úrovni některé z těch procesů, ke kterým tam dochází. Získané informace můžeme předat dál kolegům, kteří modelují celou atmosféru nebo nějaké její oblasti.

Předpokládám, že v uvedeném výzkumu chcete pokračovat i díky Akademické prémii. Jakým směrem půjdete?

Doposud jsme prováděli výzkum na ledových nanočásticích, kdy jsme používali čistě vodní klastry. Částice v atmosféře, aerosoly, ale nejsou obvykle čistě ledové, většina polárních stratosférických mraků obsahuje částice kyseliny dusičné anebo směsi kyseliny dusičné a kyseliny sírové. Také proto jsme v letošním roce zahájili nové experimenty – začali jsme vytvářet částice pro naši supersonickou expanzi s kyselinou dusičnou a sírovou. Zní to samozřejmě jednoduše – namísto vody vezmeme kyselinu; je to však řádově složitější, takže všechno vyžadovalo velmi dlouhou přípravu. Opět jde o výzkum trvající mnoho let, než se člověk posune od vody ke kyselině dusičné. Nicméně už máme velice zajímavé výsledky a výzkumy by nám nakonec mohly poskytnout i konkrétní čísla, která by zase mohli využít odborníci modelující atmosféru jako celek. Tyto smíšené částice se v ní totiž vyskytují ve značné míře a určují celou atmosférickou chemii.



doc. Michal Fárnik, Ph.D., DSc.

Je chemickým fyzikem, absolventem Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy v Praze, kde získal i titul Ph.D. za experimentální výzkum reakcí iontů s molekulami ve zkřížených paprscích, tedy iontového a molekulárního paprsku. Devět let strávil v zahraničí, dvakrát v Ústavu Maxe Plancka v německém Göttingenu a mezi tím na Coloradské univerzitě v Boulderu v USA. Po návratu do České republiky založil v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR novou experimentální laboratoř pro výzkum fyzikálních a chemických procesů na molekulách, což se mu podařilo i díky aparatuře, kterou přivezl do Prahy z Göttingenu. Rozšířil ji a vybudoval jedinečné zařízení pro studium volných klastrů a nanočástic v molekulových paprscích ve vakuu. Tím položil základ nového výzkumného směru v Česku a založil v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského nové oddělení dynamiky molekul a klastrů, v jehož čele stojí.

elektron, který ji nastartuje – a přesně to můžeme zase studovat v naší aparatuře. Můžeme si vytvořit částici, ať už z vodního nebo jiného ledu, posadit na ni nějaké jednoduché molekuly, třeba amoniak nebo oxid uhelnatý, a vytvořit z nich molekulu, která je základem pro složité organické sloučeniny. Sledujeme, jestli vůbec dochází k nějaké syntéze a zda se tímto způsobem dá složitější molekula vytvořit. Jinými slovy zkoumáme elementární proces, který může být zajímavý pro astrochemii, ale zrovna tak může být relevantní pro nějaké technologické postupy.

Další směr výzkumu, o němž jste se už také zmiňoval a který je určitě atraktivní i pro širokou veřejnost, je výzkum možných způsobů vzniku složitějších, organických molekul ve vesmíru. Můžete to krátce osvětlit?

Zajímá nás astrochemie a astrofyzika. Ve vesmíru je chemie velice specifická, protože jde o prázdný prostor, o vakuum – jak tam v tom případě může dojít k chemickým reakcím? K nim je třeba, aby se srazily nějaké molekuly, ale těch je málo. Zkoumají se v podstatě dva mechanismy. Jedním jsou reakce, do nichž vstupuje iont a molekula, neboť mezi nimi vždycky působí přitažlivá síla. Proto kdykoli se potkají, může dojít k reakci. Jeden způsob, jak mohou v mezihvězdném prostoru probíhat chemické reakce, je tudíž reakce mezi ionty a neutrálními molekulami – což se studuje už mnoho let.

A druhý mechanismus?

O něm se také mnoho let ví, ale studuje se hůř. Týká se reakce na prachových nebo ledových zrnech. Ve vesmíru se vyskytuje obrovská spousta malých objektů i nanoobjektů, částic většinou z křemíku a dalších sloučenin, navíc ještě pokrytých vrstvou ledu. Může to být vodní led, může to být i led z jiných sloučenin. Když se na takovou částici posadí nějaká molekula, nemá dostatek aktivační energie, aby zase unikla pryč, jelikož v mnoha oblastech vesmíru panují velmi nízké teploty. Zmíněná částice tudíž funguje v podstatě jako houba, která nasává molekuly. Za miliardy let ve vesmíru se mohou různé molekuly na zmíněných částicích potkat a může dojít k chemické reakci. Třeba přiletí další foton nebo volný