

## Zpravodaj 1/2010

# Tajemství molekuly otevírá možnosti

Molekula „dimer beryllia“ je pro chemiky už mnoho let záhadou. Na základě měření vědci nedávno určili 11 vibračních hladin, a nyní tým amerických a českých vědců vrhl světlo na 12. hladinu. Jejich zjištění byla publikována v časopise Science.

Dimer beryllia složený ze dvou atomů je toxický kov v pevném skupenství obsažený v některých minerálech, který lze ve slitině s jinými kovy použít pro různé aplikace, jako jsou součásti jaderných zbraní, vysvětlili Dr. Krzysztof Szalewicz a Dr. Konrad Patkowski z americké univerzity v Delaware a Vladimír Špirko, chemik z Akademie věd ČR.

Vědci dlouho spekulovali o tom, že se oba atomy tvořící dimer beryllia od sebe odrážejí. Dr. Patkowski, hlavní autor studie, uvedl, že tyto představy byly založeny na základní teorii v chemii, která vysvětluje, jak elektrony v molekule obsazují jednotlivé orbity. Před více než 40 lety však vědci zjistili, že ve skutečnosti tyto dva atomy mezi sebou tvoří vazbu.

Pokusy zkoumat síly, které drží oba atomy beryllia při sobě, však vedly k velmi rozdílným výsledkům. Přeskočme nyní vpřed do května 2009, kdy tým z americké Emory University objevil vibrační energii atomů tvořících vazbu v 11 hladinách. Konečně se vědcům podařilo

sladit teoretické a experimentální modely.

„Molekula kmitá, takže vzdálenost mezi atomy se v čase mění. Molekula nemůže být prostě v klidu a nekmitat,“ uvedl Dr. Patkowski. „Čím větší vibrační energii molekula má, tím dále se atomy vychylují ze svých rovnovážných poloh.“

V této nejnovější studii vědci potvrdili 12. a nejvyšší vibrační hladinu molekuly beryllia. Klíčem k jejich objevu byla práce provedená Dr. Špirkem, která přinesla „přeměnu“. Vědci mohou provádět jednoduché změny na teoretické křivce interakční energie tak, aby odpovídala experimentálním zjištěním, uvedl tým. „Přeměněné verze této potenciální energie upravené dle experimentálních údajů dosti přesně odpovídají pozorovaným spektrům,“ vysvětlili.

„Výsledky [týmu z Emory] byly v souladu s naší studií, takže bylo skutečně uspokojivé vidět, jak zmizel dříve nepochopitelný rozpor mezi experimentálními a teoretickými čísly,“ uvedl Dr. Patkowski. „Jejich



práce ukázala, že jdeme správným směrem.“

„Dimer beryllia se běžně používá ve srovnávacích studiích v experimentální a teoretické fyzice, molekula však zdaleka není běžná,“ upozornil. „Je to prototyp systému, který je malý a nebezpečný pro experimentální studie vzhledem ke své toxicitě a reaktivitě a pro teoretické studie, protože standardní metody kvantové chemie zde velmi špatně fungují,“ dodal.

„Na této molekule je zajímavé, že podle našich znalostí základní che-

mie atomy nemohou vytvořit vazbu, ony ji však vytvoří – a dosti silnou. Je to pěkný model pro rozvoj nových teorií v molekulární fyzice.“

Podle Vladimíra Špirka byly výsledky této práce do Science přijaty proto, že „prokazují strategickou roli teoretického studia stavů, hrajících důležitou roli v tzv. ultrastudených srážkách a následných procesech.“

**Zdroj:** [http://ec.europa.eu/research/headlines/news/article\\_10\\_01\\_15\\_en.html](http://ec.europa.eu/research/headlines/news/article_10_01_15_en.html)

**Info:** [vladimir.spirko@marge.uochb.cas.cz](mailto:vladimir.spirko@marge.uochb.cas.cz)

## Nanočásticové železo bude čistit vodu

Je možné, že v dohledné době budou podzemní vody čistit nanočástice železa. Patentovou přihlášku na přípravu nanočásticového železa podala Univerzita Palackého v Olomouci. Základ této ekonomicky výhodné a ekologicky šetrné metody spočívá v samotné vlastnosti železa. To má snahu z organických látek vytrhnout kyslík. Běžně to vidíme kolem sebe – železo rezaví. Pokud daná látka o kyslík přijde, rozloží se. Čím menší budou části železa, a proto jsou nanočástice tak důležité, tím více se oxidační proces urychlí a v konečné fázi ( při cca 70 až 80 nanometrech) shoří.

Takto to funguje na vzduchu, říká prof. Miroslav Mašláň, vedou-

cí katedry experimentální fyziky PFF UP a Centra pro výzkum nanomateriálů. Ve vodě si čistě železo vezme kyslík v rozpuštěné podobě. Totéž se děje s organickými látkami, které případně voda obsahuje, a rozloží je tak.

Olomoučtí vědci vyřešili i druhý problém, jak zajistit, aby se nanočas-

ťice železa v horninovém prostředí pohybovaly. Jimi vyvinutá technologie to umožňuje. Metoda je ekonomicky výhodná a navíc železo je pro životní prostředí přijatelné.

**Zdroj:** [www.upol.cz](http://www.upol.cz)  
**Kontakt:** Mašláň Miroslav Prof. RNDr., CSc. +420585634301, [mail: miroslav.maslan@upol.cz](mailto:miroslav.maslan@upol.cz)



### ČESKÁ HLAVA

Tento zpravodaj je distribuovaný oborovou kontaktní organizací Věda a média u společnosti Česká hlava s.r.o. Projekt spolufinancuje Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy. Všechny materiály jsou volně k otištění i úpravám. Další informace a kontakty na [www.ceskahlava.cz](http://www.ceskahlava.cz)

Česká hlava s. r. o.,  
Vinohradská 100, 130 00 Praha 3,  
tel. +420 267 311 032, 267 312 405,  
FAX: +420 267 312 348  
e-mail: [stepanek@ceskahlava.cz](mailto:stepanek@ceskahlava.cz)