|  |  |
| --- | --- |
|  | C:\Users\ruzickovam\AppData\Local\Microsoft\Windows\INetCache\Content.MSO\42029171.tmp |

Tisková zpráva Praha 24. listopadu 2020

Akademie věd ČR
Národní 1009/3, 110 00 Praha 1
www.avcr.cz

# Voda zamrzá při 0 ℃. Čeští vědci ale zjistili, že ne vždy

**Ani bod mrazu vody už není absolutní jistota. Vědcům pod vedením Martina Kalbáče z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, Jany Vejpravové a Jiřího Klimeše z Matematicko-fyzikální fakulty UK se povedlo popsat proces, ve kterém se za určitých podmínek mění teplota, při níž voda přechází z kapalného v tuhé skupenství.**

Voda má zásadní význam pro život na Zemi. Pochopení jejích vlastností v závislosti na prostředí a okolních podmínkách je extrémně důležité. A čeští vědci teď dokázali, že pokud se voda nachází ve velmi malém ohraničeném prostoru, tuhne při teplotě desítky stupňů pod nulou.

*„Tento objev otevírá zcela nové možnosti studia chemických procesů v podchlazených kapalinách a fyzikálních vlastností kapalin v extrémním prostorovém omezení, které je typické například pro mezibuněčné prostory,“* vysvětluje potenciál objevu Jana Vejpravová.

Základní, obecně známou vlastností vody je skutečnost, že při snížené teplotě začíná tuhnout a mění se v led. Ke změně skupenství u čisté vody za normálního tlaku dochází při teplotě 0 ℃ (273,15 Kelvina). Práce publikovaná českými vědci v prestižním časopise Americké chemické společnosti *ACS Nano* však dokládá, že tomu tak nemusí být vždy.

**Super uhlík grafen jako prostředník experimentu**

Voda ve specifickém prostoru totiž tuhne až při teplotě o 33 ℃ nižší. Vědci úkaz objevili, když molekuly vody uzavřeli do extrémně malých, absolutně nepropustných výdutí grafenu vytvořených na velmi hladkém povrchu oxidu křemičitého.

Grafen je atomárně tenká a průhledná forma uhlíku, strukturou podobná grafitu. Tento tzv. dvojdimenzionální materiál má také některé zvláštní fyzikální vlastnosti. Jedná se o jeden z nejpevnějších známých materiálů na světě, jehož elektrony se chovají, jako kdyby neměly žádnou efektivní hmotnost a pohybovaly se téměř rychlostí světla.

*„Volba tohoto materiálu se navíc ukázala jako velmi šťastná, neboť tento atomárně tenký krystal, složený z atomů uhlíku uspořádaných ve vzoru včelí plástve, posloužil nejen k uzavření vody, ale
i k samotnému experimentálnímu důkazu, že voda zamrzá až při velmi nízké teplotě*,“ dodává Martin Kalbáč.

Struktura takto vzniklého „nanoledu“ se od běžného ledu výrazně liší. Zatímco běžný led, označovaný jako Ih, tvoří krystaly s tzv. hexagonální krystalovou strukturou, molekuly vody uvězněné mezi hladkým oxidem křemičitým a zvrásněným grafenem vytvářejí krystalické jádro pouze ve středu výdutí.

Molekuly vody v blízkosti grafenu jsou orientovány náhodně, což vede k tzv. amorfnímu uspořádání. Tvar grafenových výdutí však významně ovlivňuje podíl amorfního ledu, a tím i proces tání.

**Povýšení na kvantovou mechaniku**

Pro ověření experimentu vědci provedli simulace, při kterých sledovali rozpouštění ledu při vzrůstající teplotě a vliv rozpuštěné vody na grafen. Ukázalo se, že pro shodu s experimentální roztažností grafenu je nutný popis atomů uhlíku pomocí kvantové mechaniky.

Tedy že nestačí uvažovat nad atomy jako bodovými částicemi pohybujícími se podle zákonů klasické fyziky, u kterých lze přesně určit, kde se nacházejí, ale je třeba je popsat jako kvantové částice; tudíž je možné mluvit jen o pravděpodobnosti jejich výskytu v daném bodě.

*„Jelikož měl simulovaný systém téměř 100 000 atomů, činí tyto simulace jedny z největších, pro který byl tento kvantový popis kdy použit,“* dodává Jiří Klimeš, autor simulací.

**Odkaz na publikaci:** <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsnano.0c03161>

Více informací: **doc. RNDr. Ing. Martin Kalbáč, Ph.D.**
Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR
martin.kalbac@jh-inst.cas.cz
+420 777 921 060
https://www.jh-inst.cas.cz/

## Fotogalerie

|  |
| --- |
|  |
| *Martin KalbáčFOTO: Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR* |
| Obsah obrázku osoba, žena, interiér, usmívající se  Popis byl vytvořen automaticky |
| *Jana VejpravováFOTO: UNIVERSITAS* |
| Obsah obrázku osoba, muž, exteriér, držení  Popis byl vytvořen automaticky |
| *Jiří KlimešFOTO: Jiří Klimeš* |