

TISKOVÁ ZPRÁVA

Praha 27. února 2024

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

SVĚTLEM SPOUŠTĚNÁ CHEMIE V JEDINÉ MOLEKULE

Ovládat světlem chemickou strukturu látky v atomárním měřítku se zdálo dosud nemožné. Nyní vědci vyvinuli techniku vhodnou k řízení fotochemických reakcí na úrovni jednotlivých molekul. Mezinárodní tým výzkumníků, na jehož práci se podílel Tomáš Neuman z Fyzikálního ústavu AV ČR, představil dnes v časopise *Nature Nanotechnology* metodu ovládní molekulární dynamiky, která otevírá potenciálně novou kapitolu výzkumu v oblasti fotochemie.

V budoucnosti by tato metoda mohla sloužit k provádění fotochemických reakcí na úrovni jednotlivých molekul, a tak třeba spojovat molekuly do nanostruktur s novými vlastnostmi, které najdou aplikace v optoelektronice a nanotechnologiích.

V přírodě i průmyslu jsou fotochemické reakce běžně přítomny a stojí například za schopností oka registrovat světlo nebo za reakcemi vedoucími ke spojení molekul do řetízků (polymerů), která mimo jiné nachází využití v 3D tisku. Ve všech těchto případech ale se světlem zároveň reaguje velké množství molekul, což komplikuje využití fotochemie v oblasti nanosvětla.

„Od složitých pokusů alchymistů a empirických poznatků pozdějších chemiků jsme se konečně dostali k přímému experimentálnímu zobrazení a řízení mechanismů stojících za spoustou chemických reakcí spouštěných světlem, které se vyskytují jak v přírodě, tak v chemickém průmyslu,“ komentuje úspěch Tomáš Neuman z Fyzikálního ústavu AV ČR.

Právě jeho teoretické výpočty napomohly k interpretaci výsledků týmu experimentátorů Guillaumea Schully z francouzského Centre national de la recherche scientifique (CNRS) ve Štrasburku ve výzkumu vedeném Annou Rosławskou, která nyní působí v Institutu Maxe Plancka ve Stuttgartu.

Interakce světla a hmoty: co se děje mezi fotonem a jedinou molekulou

Mezinárodní tým využil pro spuštění chemické reakce v izolované molekule schopnost hrotu skenovacího tunelového mikroskopu (STM) koncentrovat světlo na atomární úroveň. Tyto speciální hroty fungují podobně jako běžné televizní antény s tím rozdílem, že namísto rádiových vln interagují se světlem, které vedou na atomárně ostrou špičku.

Kontakt pro média: **Markéta Růžičková**
Divize vnějších vztahů AV ČR
press@avcr.cz
+420 777 970 812

Petra Köppl
Fyzikální ústav AV ČR
koppl@fzu.cz
+420 603 706 597

Špička potom může být použita jako svítilna atomárních rozměrů, tedy rozměrů přibližně stokrát menších, než je vlnová délka světla. Vědcům se touto technikou podařilo soustředit světlo do objemu srovnatelného s velikostí jedné molekuly, a navíc pohybem hrotu nad různými částmi molekuly ovlivňovat její chemickou stavbu.

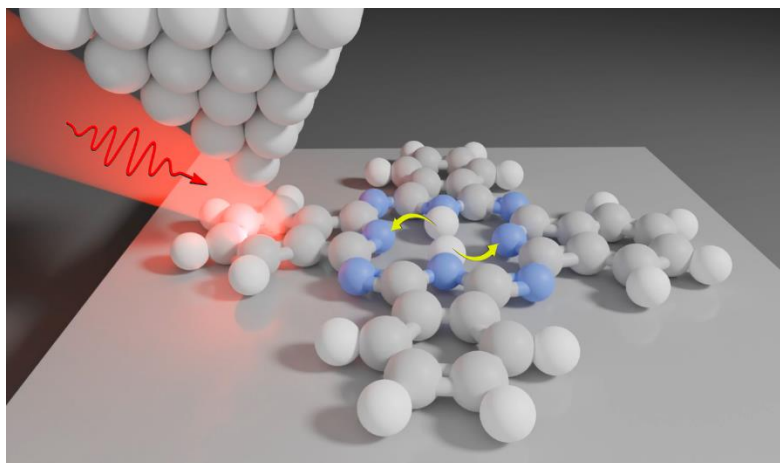
Mezinárodnímu týmu se povedlo při kryogenních teplotách touto technikou vyvolat v molekule společný pohyb dvou protonů – rychlost a výsledný stav jevu nazývaného tautomerizace navíc řídili pomocí změn vlnové délky světla a pohybu hrotu. Hrot mikroskopu nejen světlo sbírá, ale také vysílá, takže při rastrování vědci získávají z každého bodu informaci, kolik světla z molekuly vychází a jaké barvy jsou ve vyzářeném světle zastoupeny.

Na základě těchto poznatků pak vědci vyhodnocovali průběh tautomerizace. Popsaná metoda přináší detailní pohled na interakci světla s molekulou ftalocyaninu, který světlo silně absorbuje a používá se jako barvivo pro plasty nebo textil.

Více informací: [Ing. Tomáš Neuman, Ph.D.](#)
Fyzikální ústav AV ČR
+ 420 703 388 591
neuman@fzu.cz

Publikace: [Rosławska, A., Kaiser, K., Romeo, M. et al. Submolecular-scale control of phototautomerization. *Nat. Nanotechnol.* \(2024\).](#)
<https://www.nature.com/articles/s41565-024-01622-4>
<https://doi.org/10.1038/s41565-024-01622-4>

Fotogalerie



Tautomerizace molekuly ftalocyaninu je řízena lokálním osvitěm pomocí atomárně ostrého hrotu
Zdroj: Anna Rosławska