



Tisková zpráva

Čeští vědci našli novou cestu, jak řídit magnetické a elektronické vlastnosti molekul

Olomouc (4. září 2018) – Vědci z Regionálního centra pokročilých technologií a materiálů (RCPTM) Univerzity Palackého v Olomouci, Fyzikálního ústavu a Ústavu organické chemie a biochemie (ÚOCHB) Akademie věd ČR v Praze našli nový způsob, jak řídit elektronické a magnetické vlastnosti molekul. Zatímco dosud se k vybudování změny elektronického stavu molekul používaly vnější zdroje jako světlo, teplota, tlak nebo magnetické pole, čeští výzkumníci přišli s revoluční cestou, kdy využívají slabé nekovalentní interakce molekul s chemicky upraveným povrchem uhlíku. Jejich práci nedávno zveřejnil časopis Nature Communications.

„Možnost opakovaně měnit elektronickou strukturu molekul a jejich magnetické vlastnosti zajímá vědce posledních několik desetiletí díky velkému aplikačnímu potenciálu. Takové přepínání z jednoho magnetického stavu do druhého je s ohledem na malou velikost molekul velmi obtížné, ale zároveň velmi důležité pro vývoj budoucích molekulárních počítačů,“ uvedl Pavel Jelínek z RCPTM a Fyzikálního ústavu AV ČR. Molekulární přepínače nabízejí uplatnění v nanoelektronice, biologii nebo medicíně.

Elektrické, optické nebo magnetické vlastnosti molekul, ale i jejich biologická aktivita jsou určeny uspořádáním elektronů, jež se v molekulách pohybují po přesně daných dráhách, tzv. orbitalech. Molekuly obsahující orbitály obsazené pouze jedním nepárovým elektronem vykazují magnetické vlastnosti. Naopak molekuly, které mají ve všech orbitalech dva spárované elektrony, jsou nemagnetické.

„Prozatím se proces přepnutí vyvolává použitím technologicky náročných vnějších zdrojů. My jsme k přepnutí použili jedinou atomární vrstvu tuhy – grafenu, v jehož struktuře jsme některé atomy uhlíku nahradili atomy dusíku. Změnou polohy molekuly jsme pak schopni vratně přecházet z magnetického stavu na čistém grafenu do nemagnetického v oblastech dusíkových atomů. Navíc se nám poprvé podařilo tyto změny uspořádání elektronů v molekule pozorovat pomocí mikroskopu atomárních sil. Je to bezesporu velký posun v možnostech rozlišení mikroskopických rastrovacích technik,“ objasnil Jelínek.

Vlastnosti molekul se obvykle ladí vhodnou chemickou úpravou, která vede ke změně chemického složení molekuly, tj. zániku starých a vzniku nových chemických vazeb v molekule. V těchto silných, tzv. kovalentních interakcích, dochází ke sdílení elektronů, které se na vazbě podílejí. Tento přístup se však nedá uplatnit při vývoji molekulárních přepínačů, neboť chemická úprava vyvolá nevratnou změnu. Čeští vědci se proto rozhodli využít slabých nekovalentních interakcí, přestože se o nich doposud jako o možném zdroji pro vyvolání změny magnetického stavu molekuly neuvažovalo.

„Ukázalo se, že při použití cyklických molekul na bázi porfyrinů s centrálním atomem železa dojde k přeskupení elektronů, pokud se taková molekula umístí nad dusíkový defekt ve

strukturu grafenu. Kombinací teoretických výpočtů i experimentálních měření jsme potvrdili, že nekovalentní interakce mezi atomy železa a dusíku je dostatečně silná pro vyrušení magnetismu a současně dostatečně slabá, aby umožnila opětovný přechod molekuly do magnetického stavu, jakmile se tato vrátí nad čistý uhlíkový povrch grafenu,“ řekl světově uznávaný odborník na nekovalentní interakce Pavel Hobza z RCPTM a ÚOCHB.

Tato cesta řízení vlastností molekul otevírá možnosti i v dalších oblastech použití. *„Elektronické struktura ovlivňuje nejen magnetické, ale i optické, katalytické, elektrické nebo biologické vlastnosti molekul. Chemicky upravený grafen by tak mohl sloužit k vývoji nových optických senzorů, fotoluminiscenčních materiálů, katalyzátorů nebo léčiv,*“ nabízí možné aplikace generální ředitel RCPTM Radek Zbořil.

Jeho tým stál v nedávné době u řady dalších přelomových výsledků v oblasti studia grafenu a magnetismu materiálů. Ve stejném časopise Nature Communications zveřejnil například práce popisující využití grafenu k vývoji prvních nekovových 2D magnetů nebo nejmenších částic magnetických kovů.

Kontaktní osoby:

Radek Zbořil | generální ředitel RCPTM
Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci | RCPTM
E: radek.zboril@upol.cz | T: 585 634 762

Martina Šaradinová | tisková mluvčí RCPTM
Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci | RCPTM
E: martina.saradinova@upol.cz | T: 773 616 655