



Tisková zpráva

Vědci našli novou strategii pro syntézu dosud nedostupných polymerů

Olomouc (18. září 2020) – Čeští vědci ve spolupráci s kolegy ze Španělska představili v časopise *Nature Communications* nový druh polymerů, které byly dosavadními přístupy nedostupné. Tento druh polymeru může sehrát významnou roli při návrhu nových komponentů pro nanoelektroniku, jako jsou nové displeje. Zároveň výzkumníci prokázali, že vibrace molekul významně ovlivňují průběh reakcí na površích pevných látek a lze je využívat pro cílenou syntézu vodivých polymerů.

Na vývoji nové syntetické strategie, která překonává tradiční postupy organické syntézy, se podíleli vědci z Regionálního centra pokročilých technologií a materiálů (RCPTM) Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci a Fyzikálního ústavu AV ČR společně s pracovníky madridského výzkumného centra IMDEA Nanociencia.

„Tento postup nám umožňuje přípravu nových polymerů a zároveň nabourává dosavadní představy o reakčních mechanismech,“ okomentoval dosažené výsledky Pavel Jelínek z RCPTM a Fyzikálního ústavu AV ČR.

Perspektivním směrem přípravy nových nanomateriálů na bázi organických molekul je chemická syntéza na površích pevných látek, která umožňuje přípravu vodivých organických polymerních sloučenin nedostupných klasickými postupy organické syntézy. Většina chemických reakcí pro vytvoření nové chemické sloučeniny vyžaduje překonání určité energetické bariéry. Nová strategie umožňuje cíleně využívat i vhodné vnitřní vibrace molekulárních jednotek pro jejich překonání.

„V článku jsme ukázali, že specifickému vnitřnímu uspořádání vazeb, tzv. π -konjugaci, molekul vstupujících do reakce odpovídají určité vibrační stavy, které mohou být výhodné pro požadovanou chemickou reakci. Ty následně výrazně zvyšují frekvenci pokusů pro překonání energetické bariéry a umožňují chemickou reakci, která by byla dříve vyloučena,“ uvedl korespondenční autor práce Bruno de la Torre z RCPTM a Fyzikálního ústavu AV ČR.

Práce mezinárodního týmu tak odhaluje význam interních molekulárních vibrací pro pochopení chemických reakcí na površích pevných látek. Proveditelnost chemické reakce je dána dvěma faktory – bariérou aktivační energie reakce a frekvencí vibračních módů, které umožňují energetickou bariéru překonat.

Nová alternativa – urychlení některých chemických reakcí

Současný popis rychlosti chemických reakcí je založen na tzv. teorii přechodového stavu, která ve své základní formě definuje rychlost reakce pouze na základě velikosti aktivační energie. Většina chemiků se proto zaměřila na studium bariér aktivační energie ve snaze je snížit tak, aby chemická reakce mohla úspěšně proběhnout. V praxi se běžně využívá zvýšení teploty nebo přidání katalyzátoru. Jako další alternativa se nyní nabízí možnost urychlit některé chemické reakce zvýšením četnosti pokusů o překonání energetické bariéry.

„Kombinací mikroskopických experimentů a teoretických výpočtů jsme potvrdili, že volbou specifické formy π -konjugace reaktantu, tedy molekuly vstupující do reakce, lze dosáhnout vibračních režimů, které významně zvyšují frekvenci pokusů a umožňují dříve vyloučenou chemickou reakci,“ objasnil doktorand Adam Matěj z RCPTM a Fyzikálního ústavu AV ČR.

Vědci určili přesně elektronovou strukturu polymeru

Dalším přínosem práce je skutečnost, že výzkumníci s využitím mikroskopie atomárních sil s vysokým rozlišením dokázali přesně určit elektronovou strukturu polymeru. *„Objasnění elektronové struktury organických vodivých nanomateriálů je zásadní pro pochopení jejich vlastností, například vodivosti. Nové metody povrchové syntézy pak otevírají cestu pro cílenou syntézu organických polymerů s požadovanou vodivostí,“* dodal Michal Otyepka z RCPTM.

Nová syntetická strategie založená na využití konkrétních vibračních režimů prostřednictvím vhodného přizpůsobení π -konjugace prekurzorů tak může podnítit inženýrství dříve neproveditelných reakcí nových molekulárních struktur se specifickými chemickými a fyzikálními vlastnostmi.

Článek najdete zde: <https://www.nature.com/articles/s41467-020-18371-2>.

Kontaktní osoby:

Pavel Jelínek

Fyzikální ústav AV ČR | RCPTM

E: jelinekp@fzu.cz | M: 734353740

Michal Otyepka

Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého | RCPTM

E: michal.otyepka@upol.cz | M: 733 690 624