

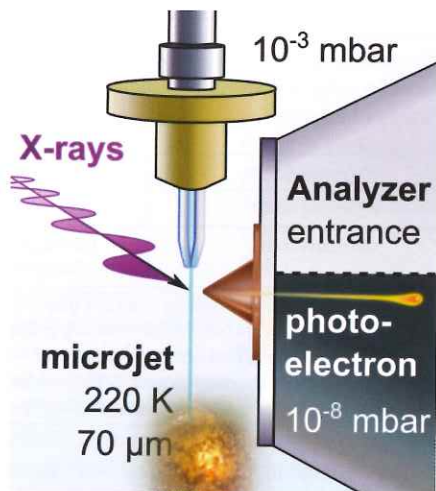
## JAK VZNIKÁ KOV?

Co znamená, že je něco kov, a jak vlastně kov vzniká? To jsou učebnicové otázky, na které existuje jednoduchá odpověď: kov je charakterizován volnými elektrony, které způsobují jeho velkou elektrickou vodivost. Jak přesně ovšem vzniká z původně vázaných elektronů kovový vodivostní pás a jak přitom materiál vypadá na mikroskopické úrovni? Právě to se podařilo ukázat vědcům ze skupiny Pavla Jungwirtha z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR ve spolupráci s výzkumníky z USA a Německa, kteří s využitím fotoelektronové spektroskopie a pokročilých výpočtů elektronové struktury popsali a na molekulové úrovni zmapovali zrod kovového roztoku alkalických kovů v amoniaku z původního elektrolytu. Výsledky svého výzkumu nyní zveřejnili v jednom z nejprestižnějších vědeckých časopisů *Science* (DOI: 10.1126/science.aaz7607), kde také jejich článek vybrali pro grafiku na obálku.

Alkalické kovy rozpuštěné v kapalném amoniaku představují modelové systémy zajímavé pro zkoumání přechodu modrého elektrolytu s nízkou koncentrací rozpuštěných elektronů k bronzově či zlatě zbarvenému kovovému roztoku (s vodivostí srovnatelnou s měděným drátem) s vysokou koncentrací volných elektronů. Ideálním nástrojem pro mapování mikroskopických změn elektronové struktury materiálu, charakteristických pro tento přechod, je fotoelektronová spektroskopie. Tato technika využívající ultravysokého vakua se dlouho považovala za neslučitelnou se zkoumáním tekavých kapalin, jako je např. kapalný amoniak. První úspěšná fotoelektronová měření čistého kapalného amoniaku se díky využití techniky mikronástržíků podařilo uskutečnit až v roce 2019 týmu Pavla Jungwirtha ve spolupráci s vědci z Jihokalfornské univerzity (USA) a na berlínském synchrotronu BESSY II.

„Takhle to dopadá, když dáte teoretické skupině na hraní laborku,“ odkazuje Pavel Jungwirth

**Obr.: Schematické zobrazení mikronástržíku tekutého amoniaku s rozpuštěnými alkalickými kovy a jeho měření na synchrotronu BESSY II v Berlíně. Na spodním konci nástržíku je umístěn obrázek kovového amoniaku zlaté barvy.**



na rozhodnutí ředitele ústavu poskytnout mu malou laboratoř.

Tento úspěch otevřel dveře k dalšímu zkoumání systémů alkalických kovů a tekutého amoniaku prostřednictvím fotoelektronové spektroskopie a vyústil v nejnovější publikaci v časopise *Science*, která mapuje přechod z elektrolytu ke kovovému roztoku kapalného amoniaku a lithia, sodíku a draslíku.

S využitím fotoelektronové spektroskopie pomocí rentgenového synchrotronního záření výzkumníci poprvé zachytili fotoelektronový signál kolem 2 eV odpovídající elektronům rozpuštěným v tekutém amoniaku. S rostoucí koncentrací alkalického kovu se pak přechod ke kovovému chování projeví ve fotoelektronovém spektru tvorbou vodivostního pásu s ostrou Fermiho hranou a přidruženými plasmonickými píky.

[16] Li, D., et al. Inactivation of murine norovirus 1, coliphage  $\phi$ X174, and Bacillus fragilis phage b40-8 on surfaces and fresh-cut iceberg lettuce by hydrogen peroxide and UV light. *Appl. Environ. Microbiol.* 2011, **77**(4), s. 1399–1404, doi: 10.1128/AEM.02131-10.

[17] Berrie, E., Andrews, L., Yezli, S., Otter, J. A. Hydrogen peroxide vapour (HPV) inactivation of adenovirus. *Lett. Appl. Microbiol.* 2011, **52**(5), s. 555–558, doi: 10.1111/j.1472-765X.2011.03033.x.

## Abstract

## VIRUS DECONTAMINATION USING HYDROGEN PEROXIDE VAPOUR

**Summary:** The current coronavirus epidemic has greatly updated the issue of methods that prevent the spread of infections in environments with an increased incidence of people, such as medical facilities, vehicles, or office buildings. Effective use of liquid decontamination agents is not possible in these areas. A suitable alternative is methods using gaseous decontamination agents, among which vapor hydrogen peroxide is an effective and safe means to eliminate viral load.

**Key words:** Vapor hydrogen peroxide, virus decontamination, large area decontamination.

Společně s nejmodernějšími výpočetními postupy pro stanovení elektronových struktur tak poskytují tato měření detailní molekulový popis přechodu nekovové látky v kovovou, a tím nám umožňují lépe porozumět, jak vzniká kovové chování a s ním spojené vlastnosti jako velmi vysoká elektrická vodivost.

„Právě publikovaná studie o kovovém amoniaku nám snad otevře dveře k realizaci našeho „nejvýběšnějšího“ snu – přípravy kovové vody tak, že ji velmi opatrně smícháme s alkalickými kovy,“ uzavírá Pavel Jungwirth.

» www.uochb.cz

## ČEŠTÍ VĚDCI PŘISPĚLI K VÝVOJI NOVÉ TŘÍDY JEDNOROZMĚRNÝCH ORGANICKÝCH VODIČŮ

Mezinárodní tým vědců za účasti výzkumníků z Regionálního centra pokročilých technologií a materiálů (RCPTM) Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci a Fyzikálního ústavu AV ČR (FZÚ) v Praze navrhl a experimentálně potvrdil možnost přípravy jednorozměrných vodivých polymerů na bázi uhlíku. Vzhledem k tomu, že uhlík je jedním z nejdostupnějších prvků, vykazují nové polymerní vodiče v porovnání s běžnými kovovými vodiči potenciálně nejen nižší výrobní náklady, ale také větší stabilitu a lepší možnosti řídit jejich materiálové vlastnosti. Společná práce českých, španělských a švýcarských vědců, kterou publikoval časopis *Nature Nanotechnology*, představuje nový přístup k vývoji nekovových vodičů využitelných v solární energetice, optických technologiích či nanoelektronice. O významu práce svědčí fakt, že editoři časopisu *Nature Nanotechnology* věnovali článku speciální komentář News & Views.

„Výhodou nových polymerů je vysoká reprodukovatelnost přípravy a očekávaná vyšší stabilita oproti původním obohaceným vodivým polymere-

rum. Možnost konstrukce stabilních uhlíkových vodivých polymerů otvírá nové možnosti pro miniaturizaci a zvýšení výkonu řady elektronických součástek,“ říká Pavel Jelínek, který vede český tým.

Kovové vodiče, které jsou v současné době nedílnou součástí většiny komerčních elektrických a elektronických zařízení, vedou elektrický proud pomocí volných elektronů v jejich strukturách. Organické molekuly na bázi uhlíku a vodíku ve většině případů volné elektrony neobsahují a chovají se jako izolanty. Jsou ovšem známý organické vodiče, tzv. vodivé polymery, které vedou elektrický proud díky obohacení jinými prvky. Tyto cizí prvky dodávají nebo odebírají ze struktury uhlíkových polymerů elektrony, čímž vzniká potřebný volný elektrický náboj odpovědný za vysokou elektrickou vodivost. Za objev těchto polymerů byla v roce 2000 udělena Nobelova cena za chemii. Výhodou polymerních vodičů oproti běžným kovovým vodičům je nenáročnost jejich výroby a snadné zpracování běžnými technologiemi, lepší mechanické vlastnosti a možnost ladit jejich elektrické i optické charakteristiky. Některé z nich proto nalezy uplatnění v organických LED diodách, solárních článcích, tranzistorech nebo různých typech senzorů. Naopak hlavní nevýhodou stávajících vodivých polymerů je jejich nízká chemická a tepelná stabilita, která souvisí s přítomností cizích prvků v jejich struktuře. Řada laboratoř ve světě se proto snaží o přípravu nových typů vodivých polymerů, které by cizí prvky neobsahovaly. Jako prvnímu se to podařilo právě česko-španělsko-švýcarskému týmu.

„V naší práci jsme studovali tzv.  $\pi$ -konjugované polymery, které jsou charakteristické střídáním jednoduchých a dvojných vazeb mezi atomy uhlíku. Nicméně vhodnou volbou základních stavebních jednotek polymeru lze připravit jednorozměrný systém, který se nachází v blízkosti fázového přechodu, na základě kompenzace vnitřního mechanického napětí polymeru a jeho elektronové struktury. Právě s použitím správných výchozích molekul vznikl vysoce vodivý polymer s volnými elektrony bez nutné přítomnosti cizích prvků. Tento přístup k syntéze 1D vodivých polymerů může vést k vývoji nové generace organických vodičů pro molekulární elektroniku,“ uvedl Pavel Jelínek.

Syntéza 1D polymerních řetězků probíhala na povrchu zlata. Chemickou strukturu a elektrické vlastnosti vědci zkoumali pomocí rastrovacího mikroskopu s chemicky upraveným hrotem, který umožňuje zobrazení jednotlivých molekul. „Vodivé polymery byly připraveny nanosením vhodných molekul, které vyvinuli španělští kolegové, na povrch zlata. Jejich následně tepelné zpracování vedlo k tvorbě dlouhých 1D řetězků bez jakýchkoliv strukturálních poruch. Základní stavební jednotky polymerů byly vzájemně propojeny uhlíkovými můstky. Elektrické vlastnosti 1D polymerů lze navíc ladit právě vhodnou volbou základních stavebních jednotek a posunout se například k vývoji 1D organických polovodičů. Vyvinuté polymery by mohly nalézt uplatnění nejen při vývoji molekulární elektroniky, ale i nových optoelektronických zařízení nebo organických solárních cel,“ říká Bruno de la Torre působící ve FZÚ a RCPTM.

Výsledky studie navazují na spolupráci španělského a českého týmu, která v nedávné minulosti vedla k vývoji chemických protokolů pro syntézu polymerů, jejichž příprava není možná pomocí běžných postupů. „Práce v *Nature Nanotechnology* ukazuje unikátní možnosti chemie na površích, kde se uplatňují odlišná chemická pravidla oproti reakcím probíhajícím v kapalném

nebo plynném prostředí. Lze tak připravit zcela unikátní materiály jako jsou právě 1D molekulární vodiče s vlastní vodivostí vyplývající přímo z jejich struktury. Tyto poznatky by mohly pomoci k řešení řady dalších vědeckých výzev a přípravě nové generace nízkodimenzionálních struktur se zcela novými optickými, magnetickými a elektrickými vlastnostmi,“ dodává Radek Zbořil z olomouckého RCPTM.

» www.fzu.cz, www.rcptm.cz

## VĚDCI Z ČVUT A AV ČR ZÍSKALI EVROPSKÝ PATENT

Patentované řešení vědců z ČVUT a AV ČR prodlouží životnost palivových článků v jaderných reaktorech za havarijních i standardních podmínek, a to pokrytím povrchu palivových článků tenkou polykristalickou diamantovou vrstvou. K výzkumu v této oblasti odborníky inspirovala například jaderná havárie ve Fukušimě. Český patent byl minulý měsíc úspěšně přijat Evropským patentovým úřadem (EPÚ), nyní si naleznou cestu do praxe.

Výsledky výzkumu jsou přesvědčivé a navzdory cennému materiálu není výroba vrstvy z diamantových nanokrystalů nedostupnou záležitostí. Vědci usilují o získání patentu v USA a Koreji a v současnosti vede Centrum pro Inovace a transfer technologií Fyzikálního ústavu AV ČR jednání o prodeji patentovaných řešení s řadou evropských, asijských a amerických výrobců jaderného paliva.

„Je to zcela nový způsob ochrany povrchu palivových článků,“ říká Irena Kratochvílová z Fyzikálního ústavu AV ČR. „Prakticky nikdo nečekal, že velmi tenká polykristalická diamantová vrstva tak významně zhorší podmínky pro korozi kovového substrátu v jaderném reaktoru, a to dokonce o desítky procent jak za pracovních, tak i za havarijních teplot,“ doplňuje vědkyně, která významným způsobem přispěla k výzkumu.

S velmi dobrými výsledky proběhly také testy ochrany zirkoniových slitin proti korozi pokrytím dvojitou vrstvou. „Tyto dvojitě vrstvené povlaky snižují oxidaci povrchů oproti nechráněným vzorkům o více než 88 % při pracovních podmínkách a o 17 % při havarijních teplotách reaktoru,“ upozorňuje spoluautorka řešení.

Inovativní řešení antikorozní ochrany povrchu zirkoniových slitin užívaných v jaderných reaktorech patentovali v rámci České republiky Radek Škoda, Jan Škarohlíd (za Fakultu strojní ČVUT) a Irena Kratochvílová, František Fendrych, Andy Taylor (za Fyzikální ústav AV ČR) již v roce 2015. Patent byl podpořen dalším výzkumem a rozsáh-

**Obr.: Schéma palivového článku s ochrannou dvojitou vrstvou**

