

TISKOVÁ ZPRÁVA

Brno 2. dubna 2025

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

VĚDECKÝ TÝM OBJEVIL SLOUČENINU, KTERÁ „NEEXISTUJE“. NAPOVÍ, JAK SYNTETIZOVAT NESTABILNÍ MOLEKULY

Podle dosavadních poznatků by vůbec neměly existovat. Řeč je o hydrátech chloridu cesného. Přesto však vědkyně a vědci z Ústavu přístrojové techniky AV ČR ve spolupráci s odborníky z Innsbrucké univerzity jejich existenci dokázali. Klíčem k jejich přípravě je speciální způsob mrazení. Tato strategie může sloužit jako nová cesta k syntéze nestabilních molekul a tím i léčiv a k lepšímu porozumění průběhu chemických reakcí ve vesmíru.

Na Zemi se přirozeně vyskytuje jediný led – tzv. hexagonální neboli šestihranný. Ať jde o drobné sněhové vločky, obrovské ledovce, zamrzlé hladiny zimních řek a rybníků nebo kostky v nápojích – všechny mají stejnou hexagonální krystalovou strukturu.

Ledů je však mnohem více. Doposud bylo v laboratořích připraveno a charakterizováno přinejmenším 20 různých druhů krystalického ledu a několik dalších amorfních forem (bez pravidelné struktury). Ke svému vzniku obvykle potřebují velmi nízké teploty, vysoké tlaky a extrémně rychlé mrazení, tedy podmínky, kterých v přírodě nelze běžně dosáhnout.

„Neexistující“ sloučenina ve zmrzlých solných roztocích

Zdánlivě obyčejné skupenství vody je tak pro odborníky v mnoha ohledech stále záhadou. Brněnští vědci a vědkyně ze skupiny Viléma Neděly z Ústavu přístrojové techniky AV ČR ve spolupráci s Thomasem Loertingem z Innsbrucké univerzity zkoumali vlastnosti slaných amorfních ledů – tedy ledů bez pravidelné krystalické struktury –, které byly připraveny z roztoku obsahujícího chlorid cesný.

Tyto ledy vznikly extrémně rychlým zchlazením mikroskopických kapiček slaného roztoku na teplotu -196 °C nebo stlačením „obyčejného“ ledu pod tlakem 1,6 GPa při stejné teplotě. „Při takovém zchlazení se ve vodě nevytvoří krystalky ledu, a voda tak zůstává zamrzlá v neuspořádané podobě typické pro kapalinu. Při následném ohřevu amorfního ledu se molekuly přeuspořádají a teprve tehdy vzniknou drobné ledové krystalky,“ popisuje Ľubica Vetráková, vědkyně z Ústavu přístrojové techniky AV ČR. Tato krystalizace z amorfního stavu za nízkých teplot se od běžného mrznutí kapaliny výrazně liší.

Kontakt pro média: **Eliška Zvolánková**
Divize vnějších vztahů AV ČR
press@avcr.cz
+420 739 535 007

Pavla Schieblová
Ústav přístrojové techniky AV ČR
schieblova@isibrno.cz
+420 734 218 279

To je i důvod, proč vědci v takto připraveném ledu objevili molekuly, které by podle dosavadních experimentálních výsledků a výpočtových modelů vůbec neměly existovat. Chlorid cesný je totiž jednou ze solí, jež kvůli nestabilitě hydrátů žádné hydráty netvoří – neváže na sebe vodu.

„Právě díky špičkovým A-ESEM technologiím bylo možné „neexistující“ hydráty poprvé vidět.“

A přesto tým vědců z Brna a Innsbrucku v takto speciálně připraveném ledu objevil hned několik druhů těchto hydrátů. Jejich existenci výzkumníci prokázali kombinací metod diferenční skenovací kalorimetrie, rentgenové difrakce a pokročilé environmentální rastrovací elektronové mikroskopie (A-ESEM). Jedinou zobrazovací metodu tým Viléma Neděly z Ústavu přístrojové techniky AV ČR světu představil asi před pěti lety. „Právě díky špičkovým A-ESEM technologiím, díky nimž se nedávno podařilo unikátním způsobem zobrazit nanostrukturu povrchové vrstvy chromozomu, bylo možné „neexistující“ hydráty poprvé vidět. K tomuto účelu byl mikroskop nově vybaven první testovací verzí unikátního cryo-držáku, v ÚPT AV ČR vyvíjeného pro použití v environmentálně kompatibilních podmínkách relativně vysokého tlaku plynů,“ uvádí Vilém Neděla.

Objev vědeckého týmu [publikoval](#) prestižní časopis *ACS Physical Chemistry Au*. Výzkum spolufinancovaly [nový program](#) Strategie AV21 *Moc předmětů: Materialita mezi minulostí a budoucností*, program Functional Materials Science (FunMAT) na Innsbrucké univerzitě, Rakouská grantová agentura FWF (grant P36634) a Rakouská akademie věd (ÖAW).

Nová cesta k přípravě nestabilních sloučenin

Molekuly jsou při mrazení vystavovány extrémním podmínkám – a nejde jen o nízkou teplotu. „Při mrazení vodného roztoku jsou všechny látky rozpuštěné ve vodě vytěsněny do mezer mezi krystaly tvořícího se ledu. V tomto meziprostoru je velmi málo místa, takže se molekuly dostávají mnohem blíže k sobě – zvyšuje se lokální koncentrace látek a mění se i parametry prostředí, jako je pH či iontová síla. Reakce v tomto stísněném prostoru proto často probíhají jiným způsobem, než by probíhaly v kapalném roztoku,“ vysvětluje Ľubica Vetráková z ÚPT AV ČR.

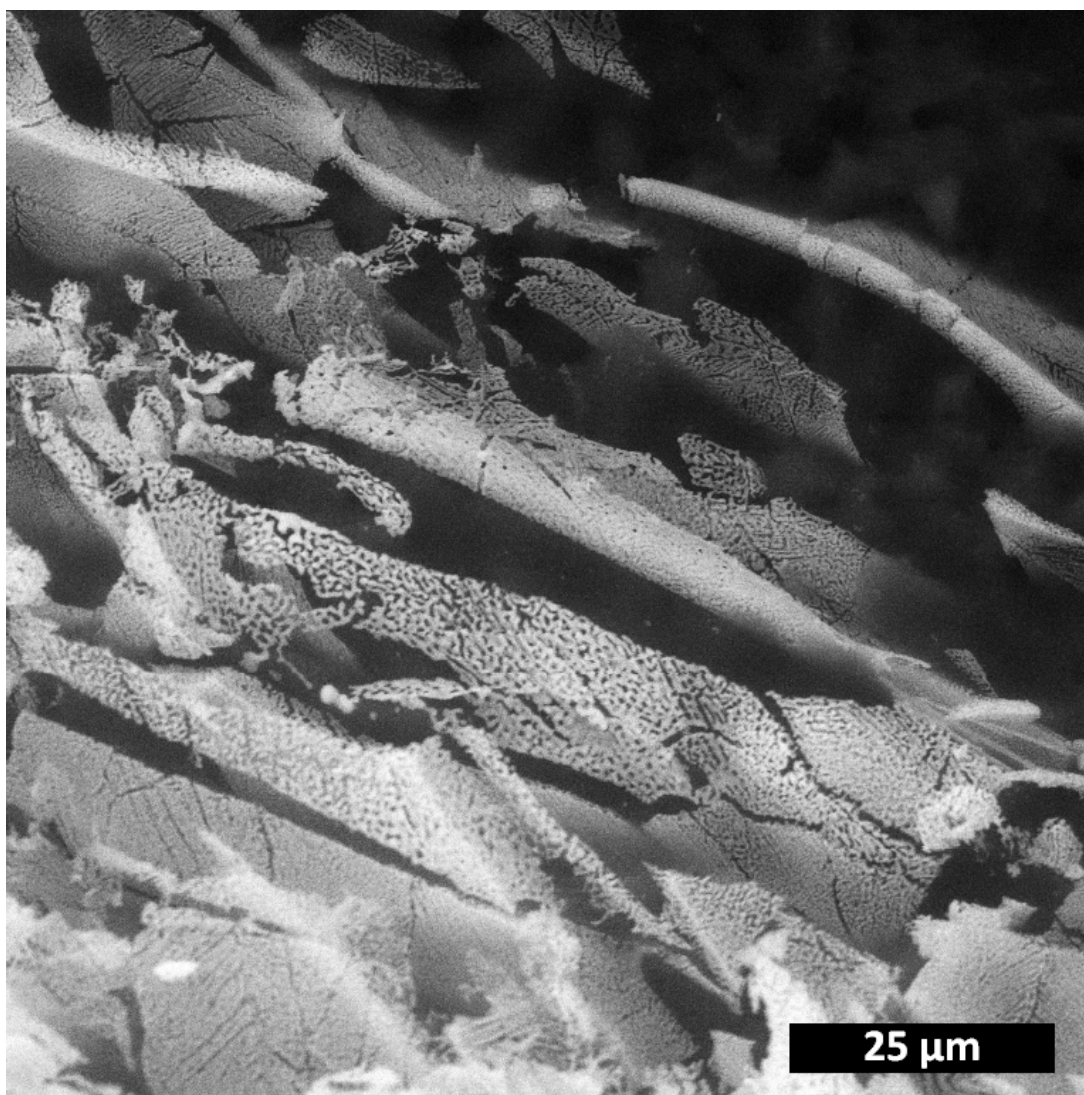
Přístup brněnských a innsbruckých vědců se jeví jako slibná cesta k laboratorní přípravě mnoha dalších molekul, které jsou považovány za nestabilní a jež se obtížně syntetizují konvenčními metodami. Tvorba amorfního ledu a jeho následná krystalizace za nízkých teplot může nestabilním molekulám poskytnout vhodné podmínky pro jejich vznik a existenci. Tento přístup by se mohl uplatnit například při syntéze některých léčiv.

Přestože amorfní led v přírodě na Zemi nenajdeme, ve vesmíru je běžný. Obsahují ho i komety nebo mezihvězdný prach. Když se kometa přiblíží ke Slunci, amorfní led se mírně ohřeje a nastane krystalizace za nízkých teplot, při které mohou vzniknout vysoce metastabilní látky a vyvinout se nové, dosud neznámé druhy molekul. Proto může být příprava nových molekul metodou krystalizace amorfního ledu za nízkých teplot klíčem k pochopení, jakým způsobem probíhají chemické reakce ve vesmíru.

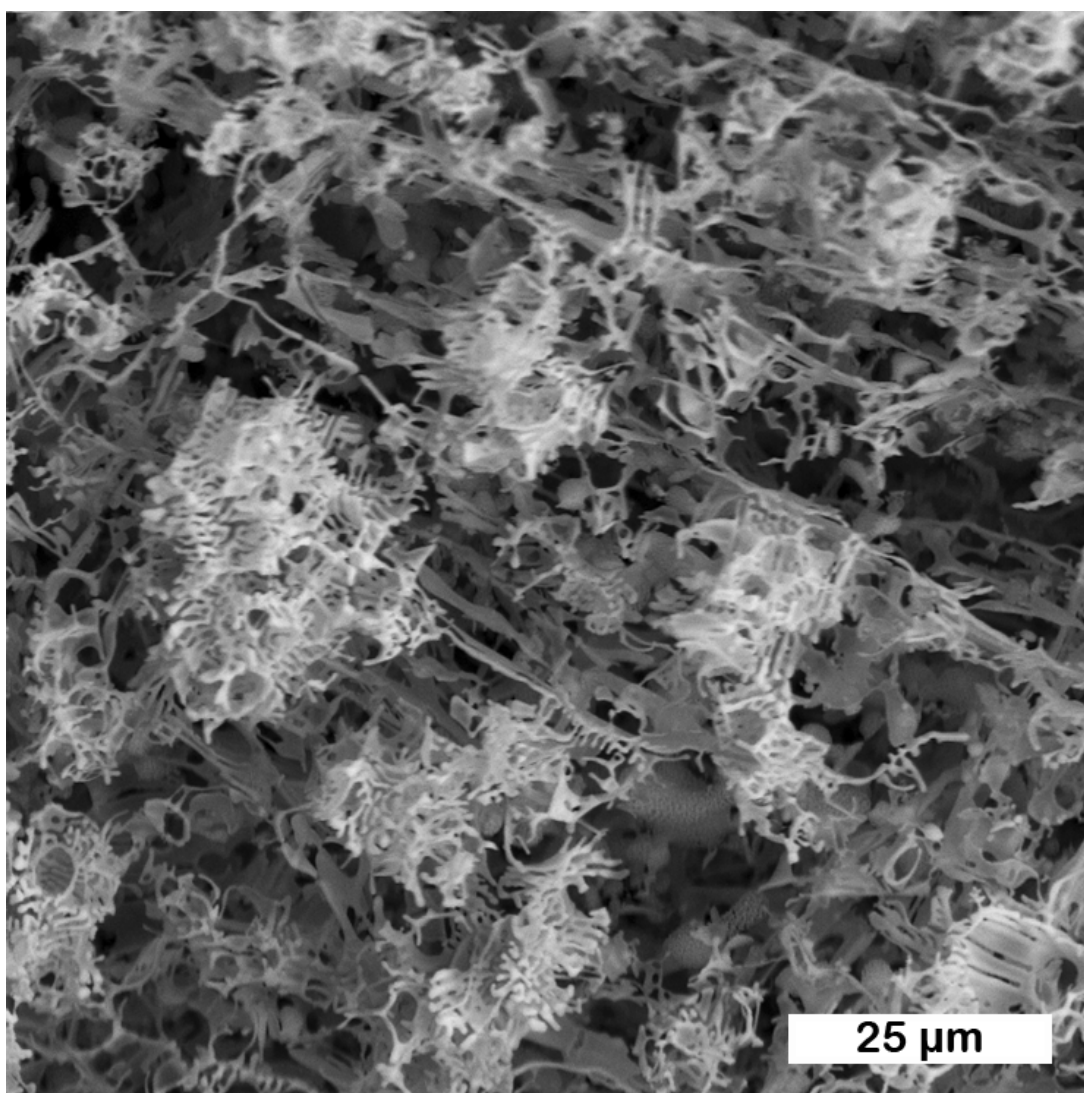
Více informací: **doc. Vilém Neděla**
Ústav přístrojové techniky AV ČR
vilem@isibrno.cz
+420 604 192 469

Publikace: In Spite of the Chemist's Belief: Metastable Hydrates of CsCl. Kamila Závacká, Ľubica Vetráková, Johannes Bachler, Vilém Neděla, Thomas Loerting* *ACS Phys. Chem. Au* **2025**
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acspchemau.4c00093>

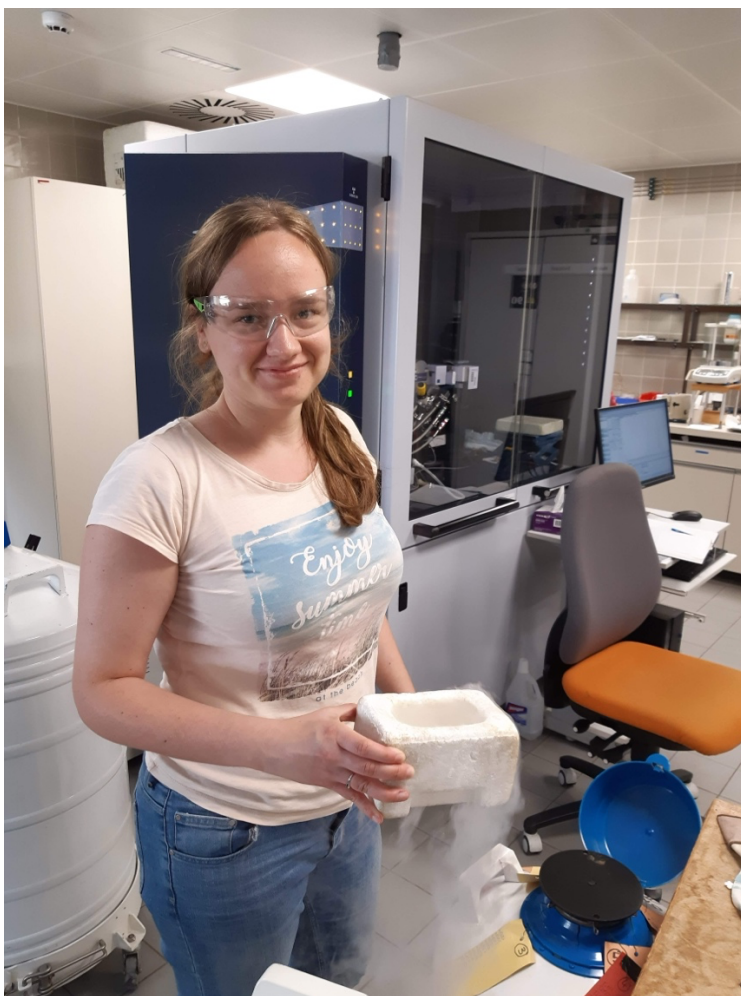
Fotogalerie:



Struktura žil hydrátu chloridu cesného (bílá) v ledu (tmavěšedá) zobrazená pomocí pokročilé environmentální elektronové mikroskopie při -50 °C



Struktura žil chloridu cesného (bílá) v ledu (tmavošedá) zobrazená pomocí pokročilé environmentální elektronové mikroskopie při -50 °C



Vědkyně Kamila Závacká z Ústavu přístrojové techniky AV ČR v innsbrucké laboratoři při přípravě amorfního ledu



Tým brněnských a innsbruckých vědců (zleva Johannes Bachler, Vilém Neděla a Thomas Loerting). Na monitoru počítače dole Ľubica Vetráková a vlevo nahoře Kamila Závacká.