



!!! EMBARGO PRASOWE DO DNIA 17.05.2011, GODZ. 20:00 CEST !!!

Warszawa, 17 maja 2012

Pięć odmian rekordowo dużych agregatów cząsteczek wody

Polsko-amerykański zespół fizyków i chemików odkrył kompleksy cząsteczek wody o rekordowych rozmiarach. Agregaty składają się z sześciu, siedmiu i dziewięciu cząsteczek. W przypadku heksamerów udało się precyzyjnie wyznaczyć ich trzy podstawowe konfiguracje przestrzenne. W pracach uczestniczył Instytut Fizyki PAN w Warszawie.

Woda jest substancją powszechną we Wszechświecie. Unikatowe własności jej cząsteczek mają kluczowe znaczenie dla życia na Ziemi. Cząsteczki wody mogą łączyć się w mniej lub bardziej stabilne kompleksy. Od lat 90. ubiegłego wieku nauka dysponowała precyzyjnymi danymi eksperymentalnymi o istnieniu agregatów złożonych z nie więcej niż pięciu cząsteczek wody. Międzynarodowy zespół naukowców, w którym uczestniczył Instytut Fizyki PAN, właśnie potwierdził na drodze doświadczalnej istnienie trzech odmian wodnych heksamerów oraz po jednej heptameru i nonameru. Kompleksy te składają się z (odpowiednio) sześciu, siedmiu i dziewięciu cząsteczek wody.

„Wyniki pomiarów, otrzymanych przez naszych amerykańskich kolegów i poddanych analizie u nas w instytucie, wyjątkowo precyzyjnie zgadzają się z przewidywaniami teoretyków. Żartujemy nawet, że tak doskonały stopień zgodności teorii z doświadczeniem spotka się tylko w opracowaniach z pracowni studenckich”, mówi prof. Kisiel, jeden z głównych współautorów publikacji, która właśnie ukazała się w prestiżowym czasopiśmie naukowym „Science”.

Część doświadczalną badań przeprowadził zespół prof. Brooksa H. Pate’a z Wydziału Chemii przy University of Virginia. Analizę wyników wykonał prof. dr hab. Zbigniew Kisiel z warszawskiego Instytutu Fizyki PAN. Model dynamiki cząsteczek wody na potrzeby eksperymentu stworzyli fizycy z Bucknell University.

Doświadczenie polegało na wstrzykiwaniu gazu przez wąską dyszę do komory wysokopróżniowej. Gazem był obojętny chemicznie neon z jednocentową zawartością par wody, który w warunkach próżni gwałtownie ekspandował (z prędkością ponaddźwiękową), schładzając się w ciągu mikrosekund od temperatury pokojowej do zaledwie jednego kelwina. We wnętrzu komory był wykonywany precyzyjny pomiar mikrofalowy za pomocą specjalnie skonstruowanych impulsów pobudzających, analogiczny do sposobu działania tomografu rezonansu magnetycznego. W trakcie eksperymentu naukowcy mierzyli, które częstotliwości mikrofal we wnęce są pochłaniane przez cząsteczki wody.

Dzięki pomiarom zaobserwowano dużą liczbę nieznanych wcześniej linii widmowych. Wiele z nich można było wytłumaczyć zakładając, że promieniowanie mikrofalowe wchodziło w oddziaływanie z

agregatami wody zbudowanymi z sześciu cząsteczek ułożonych w różnych wariantach. Zaobserwowano także linie odpowiadające kompleksom zbudowanym z siedmiu i dziewięciu cząsteczek wody.

Analiza widm heksamerów posłużyła do wyznaczenia stałych opisujących sposób rotacji cząsteczek wody względem trzech osi przestrzennych. Stałe te pozwalają łatwo obliczyć moment bezwładności, który zawiera informację o rozmieszczeniu mas w cząsteczce. „Masy atomowe znamy bardzo dokładnie. Dysponując momentami bezwładności otrzymanymi ze stałych rotacyjnych, wyznaczyliśmy pozycje mas w cząsteczkach wody tworzących poszczególne agregaty. Wyliczone pozycje atomów tlenu w agregatach doskonale zgadzały się z pozycjami podanymi przez teoretyków z naszego zespołu”, wyjaśnia prof. Kisiel.

W celu zweryfikowania wyników analiz badacze przeprowadzili kolejne eksperymenty. Modyfikowali w nich momenty bezwładności cząsteczek wody, podmieniając atomy tlenu 16 na cięższy izotop 18, a następnie sprawdzali zgodność wyników z teorią. Dokładność wyznaczonych odległości tlen-tlen otrzymano na poziomie 0,01 angstroma (1 Å to jedna dziesięciomiliardowa część metra), podobna jest także zgodność z przewidywaniami teoretycznymi.

Dzięki uważnej analizie danych wśród heksamerów wyodrębniono trzy typy (konformacje) agregatów cząsteczek wody. Pryzma to układ, w którym cząsteczki wody są rozmieszczone w wierzchołkach graniastostłupa o podstawie trójkątnej i łączą się dziewięcioma wiązaniami wodorowymi. Inny agregat przypomina rozchyloną książkę, w której cząsteczki wody znajdują się w zewnętrznych narożnikach obu okładek oraz po obu stronach grzbietu; tu liczba wiązań wynosi siedem. W trzecim typie heksamerów cząsteczki rozmieszczone są w taki sposób, że ich układ przypomina klatkę, w tym przypadku z ośmioma wiązaniami.

Cząsteczki ciekłej wody mogą się łączyć ze sobą za pomocą czterech wiązań wodorowych. Dwa z nich to wiązania poprzez protony (czyli wodory), pozostałe dwa są realizowane za pomocą wolnych par elektronowych. Wiązania wodorowe w poszczególnych odmianach agregatów mają szereg charakterystycznych długości. „Nasze doświadczenia pokazały spójny obraz różnorodności wiązania wodorowego w heksamerach i odzwierciedlają bogactwo wiązań wodorowych występujących w ciekłej wodzie na poziomie nanoskali. Spodziewamy się, że zbadane przez nas konfiguracje cząsteczek mogą już występować w warunkach naturalnych, jako mały fragment struktury zwykłej wody”, stwierdza prof. Kisiel.

Badacze sprawdzili następnie, które typy zaobserwowanych agregatów są najbardziej stabilne. W tym celu podmienili gaz nośny, neon, na argon, charakteryzujący się inną termodynamiką. W nowych warunkach mniej stabilne układy cząsteczek nie powstawały. „Najtrwalszym heksamerem okazał się ten, w którym cząsteczki wody układały się w klatkę”, zauważa prof. Kisiel.

Niektóre linie widmowe otrzymane na University of Virginia udało się zaobserwować także za pomocą aparatury działającej w IF PAN. Wkrótce zostanie ona wyposażona w najnowszą elektronikę, zakupioną w ramach grantu MAESTRO z Narodowego Centrum Nauki. Modernizacja sprzętu pozwoli fizykom z IF PAN na prowadzenie na miejscu dalszych badań eksperymentalnych, także nad innymi tak istotnymi dla poznania nanostruktury otaczającej nas materii obiektami jak agregaty wody.

Precyzyjne metody eksperymentalne, użyte w badaniach nad heksamerami wody, służą jako sprawdzian opisu teoretycznego i oprogramowania używanego do modelowania struktur materii przy pomocy metod chemii kwantowej. Narzędzia te stosuje się m.in. przy poszukiwaniu nowych związków chemicznych i leków.

Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk (IF PAN) z siedzibą w Warszawie powstał w 1953 roku jako ogólnokrajowa instytucja zajmująca się wszystkimi dziedzinami fizyki doświadczalnej i teoretycznej. Obecnie Instytut prowadzi badania z fizyki ciała stałego oraz fizyki atomowej i cząsteczkowej, w tym fizyki półprzewodników, promieniowania i magnetyzmu. Przedmiotem szczególnego zainteresowania są spintronika i nanotechnologie. IF PAN uczestniczy w ponad 20 międzynarodowych projektach badawczych, publikuje ok. 300 prac naukowych rocznie.

KONTAKTY DO NAUKOWCÓW:

prof. dr hab. **Zbigniew Kisiel**
Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk
tel. +48 22 1163227
email: kisiel@ifpan.edu.pl

POWIĄZANE STRONY WWW:

<http://www.ifpan.edu.pl>
Strona WWW Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk.

<http://press.ifpan.edu.pl>
Serwis prasowy Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk.

IFPAN120517b_fot01s.jpg

HR: http://press.ifpan.edu.pl/news/12/05/IFPAN120517b_fot01.jpg

Wizualizacja odmian heksamery wody, odkrytych eksperymentalnie i opisanych przy udziale naukowców z Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. Od lewej konformacje: pryzma, książka, klatka. (Źródło: IF PAN)

IFPAN120517c_vis01.pdf

Link: http://press.ifpan.edu.pl/news/12/05/IFPAN120517c_vis01.pdf

Interaktywna, trójwymiarowa wizualizacja heksamery wody w układzie pryzmy. Odmianę odkryto eksperymentalnie i opisano przy udziale naukowców z Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. Do obejrzenia wizualizacji potrzebny jest program Adobe Acrobat Reader X. (Źródło: IF PAN)

IFPAN120517c_vis02.pdf

Link: http://press.ifpan.edu.pl/news/12/05/IFPAN120517c_vis02.pdf

Interaktywna, trójwymiarowa wizualizacja heksamery wody w układzie klatki. Odmianę odkryto eksperymentalnie i opisano przy udziale naukowców z Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. Do obejrzenia wizualizacji potrzebny jest program Adobe Acrobat Reader X. (Źródło: IF PAN)

IFPAN120517c_vis03.pdf

Link: http://press.ifpan.edu.pl/news/12/05/IFPAN120517c_vis03.pdf

Interaktywna, trójwymiarowa wizualizacja heksamery wody w układzie książki. Odmianę odkryto eksperymentalnie i opisano przy udziale naukowców z Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. Do obejrzenia wizualizacji potrzebny jest program Adobe Acrobat Reader X. (Źródło: IF PAN)