



Warszawa, 2 marca 2016

## **Superman może zacząć się bać: mamy przepis na (prawie) kryptonit!**

*Chemicy-teoretycy z Instytutu Chemii Fizycznej PAN w Warszawie odkryli, jak zsyntetyzować pierwszy trwały związek kryptonu. Okazuje się, że egzotyczna substancja może powstawać w warunkach ekstremalnie dużych ciśnień, a jej wytworzenie nie wykracza poza możliwości współczesnych laboratoriów.*

Kryształy kryptonitu, materiału śmiertelnie groźnego dla Supermana i jego rasy, miały jakoby powstać we wnętrzu planety Krypton, a więc najprawdopodobniej w warunkach bardzo dużych ciśnień. Protoplasta nazwy, prawdziwy krypton, to pierwiastek o liczbie atomowej 36, gaz szlachetny uważany za niezdolny do formowania trwałych związków chemicznych. Jednak w publikacji w czasopiśmie „Scientific Reports” dwuosobowy zespół chemików-teoretyków z Instytutu Chemii Fizycznej PAN (IChF PAN) w Warszawie przedstawił możliwość zsyntetyzowania nowego, krystalicznego materiału, w którym atomy kryptonu byłyby chemicznie związane z atomami innego pierwiastka.

„Przewidziana przez nas substancja to związek kryptonu nie z azotem, lecz z tlenem. W konwencji komiksu należałoby go zatem nazwać nie tyle kryptonitem, ile kryptoksydem. Jeśli więc Superman nas czyta, uspokajamy: na razie nie ma powodu do paniki!”, uśmiecha się dr Patryk Zaleski-Ejgierd (IChF PAN) i dodaje: „Nasz monotlenek kryptonu, KrO, najprawdopodobniej w ogóle nie istnieje w naturze. Zgodnie z obecną wiedzą, głęboko we wnętrzach planet, a więc w jedynych miejscach, gdzie mamy ciśnienia wystarczające do jego syntezy, ani tlen, ani tym bardziej krypton po prostu nie występują”.

W laboratoriach, w warunkach kriogenicznych, wytwarzano już wcześniej związki kryptonu. Były to jednak zaledwie pojedyncze, liniowe i małe cząsteczki typu wodór-węgiel-krypton-węgiel-wodór. Polskich chemików ciekawiło, czy można znaleźć warunki, w których krypton nie tylko wiązałby się chemicznie z innym pierwiastkiem, ale także był zdolny tworzyć rozległą i trwałą sieć krystaliczną. Do poszukiwań, sfinansowanych z grantu OPUS Narodowego Centrum Nauki, badacze wykorzystali algorytmy genetyczne oraz modele zbudowane w ramach tzw. teorii funkcjonałów gęstości elektronowej. W dziedzinie fizyki ciała stałego teoria ta od lat jest podstawowym narzędziem opisu i badania świata cząsteczek chemicznych.

„Nasze symulacje komputerowe sugerują, że kryształy monotlenku kryptonu będą się formować przy ciśnieniu w zakresie od 3 do 5 mln atmosfer. To ogromne ciśnienie, lecz można je otrzymać nawet w dzisiejszych laboratoriach, umiejętnie ściskając próbki w kowadłach diamentowych”, mówi doktorant Paweł Łata (IChF PAN).

Sieci krystaliczne są zbudowane z atomów lub cząsteczek rozmieszczonych w przestrzeni w sposób uporządkowany. Najmniejszy powtarzający się fragment takich struktur – ich podstawowa 'cegielka' – jest nazywany komórką elementarną. W kryształach soli kuchennej komórka elementarna ma kształt sześcianu, a atomy sodu i chloru, rozmieszczone naprzemiennie, są osadzone w jej narożnikach, na tyle blisko siebie, że wiąże je wiązanie kowalencyjne (chemiczne).

Komórka elementarna monotlenku kryptonu jest prostopadłościanem o podstawie rombu, z atomami kryptonu w narożnikach. Dodatkowo pośrodku dwóch naprzeciwległych ścian bocznych znajduje się po jednym atomie kryptonu.

„Gdzie tu tlen? Na tych ściankach bocznych komórki elementarnej, na których mamy pięć atomów kryptonu, są one rozmieszczone podobnie jak kropki liczby 5 w kostce do gry. Pojedyncze atomy tlenu lokują się między atomami kryptonu, ale tylko wzdłuż przekątnej – i to wyłącznie jednej! Zatem na każdej ściance z piątką atomów kryptonu mamy tylko dwa atomy tlenu. Mało tego, tlen nie leży dokładnie na tej przekątnej: jego jeden atom jest od niej nieco odsunięty w jedną stronę, a drugi w drugą”, opisuje doktorant Łata.

W tak specyficznej komórce elementarnej każdy atom tlenu wiąże się chemicznie z dwoma najbliższymi atomami kryptonu. Przez kryształ monotlenku kryptonu będą zatem przebiegały zygzakowate łańcuchy  $\text{Kr/O}\backslash\text{Kr}\backslash\text{O}/\text{Kr}$ , tworzące długie, polimerowe struktury. Obliczenia wskazują, że kryształy takiego monotlenku kryptonu powinny mieć cechy izolatora. Można przypuszczać, że będą miały ciemną barwę i najprawdopodobniej nie będą przezroczyste.

Teoretycy z IChF PAN znaleźli także drugi, nieco mniej stabilny związek kryptonu: jego czterotlenek  $\text{KrO}_4$ . Materiał ten, prawdopodobnie o właściwościach typowych dla metali, ma prostszą budowę krystaliczną i mógłby się tworzyć przy ciśnieniach powyżej 3,4 mln atmosfer.

Po uformowaniu, oba rodzaje kryształów tlenków kryptonu prawdopodobnie mogłyby istnieć przy nieco mniejszych ciśnieniach niż wymagane do ich powstania. Ciśnienie ziemskie jest jednak tak niskie, że na naszej planecie kryształy te uległyby natychmiastowemu rozpadowi.

„Reakcje zachodzące przy ekstremalnie dużych ciśnieniach to niemal nieznaną, bardzo, bardzo egzotyczna chemia. Mówimy o niej: chemia 'na krawędzi'. Nierzadko ciśnienia potrzebne do przeprowadzenia syntez są tak gigantyczne, że na razie nie ma co próbować wytwarzać ich w laboratoriach. Zawodzą wtedy nawet metody teoretycznego opisu! Ale to właśnie ta nieintuicyjność jest tu najciekawsza: od pierwszego do ostatniego kroku syntezy nigdy nie wiadomo, co się wydarzy”, mówi dr Zaleski-Ejgierd – i wraca do komputera, na którym dobiegają końca symulacje kolejnych syntez.

Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (<http://www.ichf.edu.pl/>) został powołany w 1955 roku jako jeden z pierwszych instytutów chemicznych PAN. Profil naukowy Instytutu jest silnie powiązany z najnowszymi światowymi kierunkami rozwoju chemii fizycznej i fizyki chemicznej. Badania naukowe są prowadzone w dziewięciu zakładach naukowych. Działający w ramach Instytutu Zakład Doświadczalny CHEMIPAN wdraża, produkuje i komercjalizuje specjalistyczne związki chemiczne do zastosowań m.in. w rolnictwie i farmacji. Instytut publikuje około 200 oryginalnych prac badawczych rocznie.

#### **KONTAKT:**

dr **Patryk Zaleski-Ejgierd**  
Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie  
tel. +48 22 3433355  
email: [pzaleski@ichf.edu.pl](mailto:pzaleski@ichf.edu.pl)

### **PUBLIKACJE NAUKOWE:**

„Krypton oxides under pressure”; P. Zalewski-Ejgierd, P. Lata; Scientific Reports, 2016 Feb 2; 6:18938; DOI: 10.1038/srep18938

### **POWIĄZANE STRONY WWW:**

<http://www.ichf.edu.pl/>

Strona Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk.

<http://www.ichf.edu.pl/press/>

Serwis prasowy Instytutu Chemii Fizycznej PAN.

### **MATERIAŁY GRAFICZNE:**

**ICHF160302b\_fot01s.jpg**

HR: [http://ichf.edu.pl/press/2016/03/ICHF160302b\\_fot01.jpg](http://ichf.edu.pl/press/2016/03/ICHF160302b_fot01.jpg)

Metodę syntezy pierwszego trwałego związku kryptonu znaleźli chemicy-teoretycy z Instytutu Chemii Fizycznej PAN w Warszawie. (Źródło: IChF PAN, Grzegorz Krzyżewski)

**ICHF160302b\_fot02s.jpg**

HR: [http://ichf.edu.pl/press/2016/03/ICHF160302b\\_fot02.jpg](http://ichf.edu.pl/press/2016/03/ICHF160302b_fot02.jpg)

Struktury krystaliczne monotlenku kryptonu KrO: po lewej bardziej stabilna, po prawej mniej. Atomy kryptonu w kolorze niebieskim, atomy tlenu na czerwono. (Źródło: IChF PAN)