



Warszawa, 31 maja 2017

Kwantowa mimikra: W atomowych „śmigłach” zjawiska kwantowe potrafią imitować zwykłą fizykę

Niektóre grupy atomów w cząsteczkach mogą się obracać. Ruch ten pojawia się pod wpływem przypadkowych bodźców z otoczenia i nie jest ciągły, lecz skokowy. Zwykle uważa się, że takie przeskoki zachodzą w sposób typowy dla obiektów klasycznych, takich jak śmigło wentylatora potrącane palcem. Chemicy z instytutów Polskiej Akademii Nauk w Warszawie zaobserwowali jednak rotacje przebiegające według nieintuicyjnych reguł świata kwantów. Okazało się, że w odpowiednich warunkach kwantowe rotacje potrafią bardzo dobrze naśladować zwykłe, klasyczne obroty.

Chemię często przedstawia się jako niemal mechaniczną zabawę w łączenie kuleczek-atomów za pomocą patyczków-wiązań. Prof. dr hab. Sławomir Szymański z Instytutu Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk (IChO PAN) w Warszawie jest jednak pewien, że w rzeczywistości za część efektów obserwowanych w cząsteczkach odpowiadają znacznie bardziej egzotyczne i nieintuicyjne zjawiska o kwantowej naturze. Od lat rozwija on model opisujący w sposób kwantowy skokowe obroty całych grup atomów w cząsteczkach. Prace teoretyczne prof. Szymańskiego znalazły właśnie kolejne potwierdzenie w eksperymentach zrealizowanych w Instytucie Chemii Fizycznej PAN (IChF PAN) w Warszawie przez grupę dr. hab. Piotra Bernatowicza, opisanych na łamach czasopisma „The Journal of Chemical Physics”.

„Mechanikę kwantową w chemii stosuje się niemal wyłącznie do opisu ruchu maleńkich elektronów. Jądra atomowe, nawet tak proste jak zbudowane z pojedynczego protonu jądro wodoru, uchodzą za zbyt duże i masywne, by podlegać efektom kwantowym. W naszych pracach udowadniamy, że ten wygodny, lecz bardzo uproszczony pogląd trzeba wreszcie zacząć zmieniać, przynajmniej w odniesieniu do niektórych sytuacji”, mówi prof. Szymański.

Model kwantowych rotacji prof. Szymańskiego opisuje obroty grup atomowych zbudowanych z identycznych elementów, np. atomów wodoru. Najnowsza publikacja, zrealizowana we współpracy z grupą dr. Bernatowicza, dotyczy grup metylowych CH₃. Grupy te budują przypominają maleńkie śmigła: wokół atomu węgla tkwią tu trzy atomy wodoru, rozmieszczone w równych odstępach od siebie. Od dawna było wiadomo, że przyczepione atomem węgla do cząsteczek, grupy metylowe mogą dokonywać rotacyjnych skoków: wszystkie atomy wodoru potrafią jednocześnie obrócić się o 120 stopni wokół węgla. Obroty te traktowano zawsze jako zjawisko klasyczne, w którym wodorowe „kulki” po prostu przeskakują w „dołki” obok, właśnie zwolnione przez sąsiadów.

„Za pomocą magnetycznego rezonansu jądrowego przeprowadziliśmy trudne, ale jednocześnie precyzyjne pomiary na proszkach z monokryształów trifenyloetanu, związku o cząsteczkach zawierających po jednej grupie metylowej. Wyniki nie pozostawiają wątpliwości. Kształty zarejestrowanych przez nas krzywych, tzw. proszkowych widm rezonansowych, można wytłumaczyć tylko przy założeniu, że za rotacje grup metylowych faktycznie odpowiadają zjawiska kwantowe”, mówi dr Bernatowicz.

Pomiary rotacji grup metylowych za pomocą magnetycznego rezonansu jądrowego wymagały precyzyjnego kontrolowania temperatury w sproszkowanych substancjach. Kwantowa natura obrotów staje się bowiem dobrze widoczna tylko w niewielkim zakresie temperatur. Gdy temperatura jest zbyt niska, rotacje ustają, gdy jest zbyt wysoka, obroty kwantowe stają się nierozróżnialne od klasycznych. Doświadczenia w IChF PAN, w których kwantowa natura obrotów była wyraźnie widoczna, obejmowały przedział od 99 do 111 kelwinów.

Z badań w IChF PAN i IChO PAN wyłania się nowy obraz chemicznej rzeczywistości. Grupa CH_3 w cząsteczce nie jest już prostym wirnikiem zbudowanym z węglowego rdzenia i trzech sztywno do niego przymocowanych atomów wodoru. Jej rzeczywista natura jest inna: żaden atom wodoru nie zajmuje tu odrębnego położenia w przestrzeni, co więcej, każdy cały czas „miesza się” kwantowo z pozostałymi dwoma. Grupa metylowa, choć zbudowana z wielu atomów, w odpowiednich warunkach okazuje się być pojedynczym, spójnym tworem kwantowym, który nie przypomina żadnego obiektu znanego nam z codziennego świata.

Opis ruchu klasycznego rotatora atomowego można skonstruować używając jednej stałej mierzącej średnią częstotliwość jego przeskoków. Okazuje się, że w modelu kwantowym takie stałe muszą być dwie i zależą od temperatury. Gdy temperatura rośnie, obie stałe przybierają podobną wartość i rotacje grupy metylowej zaczynają przypominać klasyczne obroty.

„W naszych pomiarach faktycznie zaobserwowaliśmy stopniowe przekształcanie się kwantowych rotacji grup metylowych w obroty trudne do odróżnienia od klasycznych. Ten efekt należy odpowiednio rozumieć. Zjawiska kwantowe wcale nie przestawały działać, lecz w pewien sposób imitowały klasyczne przeskoki”, wyjaśnia dr Bernatowicz.

Naukowcy z IChF i IChO PAN potwierdzili już wcześniej poprawność modelu kwantowych rotacji w eksperymentach z grupami metylowymi (m.in. w cząsteczkach dimetylotryptycenu, gdzie efektem tym towarzyszyły dynamiczne przemiany sieci krystalicznej). Na eksperymentalną weryfikację czekają natomiast przewidywania dotyczące obrotów znacznie bardziej złożonej struktury atomowej: pierścienia benzenowego C_6H_6 .

„Nasze badania mają charakter podstawowy i trudno tu mówić od razu o konkretnych zastosowaniach”, zauważa prof. Szymański i zaraz uzupełnia: „Warto jednak podkreślić, że efekty kwantowe uznaje się za niezwykle czułe na oddziaływanie z otoczeniem. Chemicy i fizycy zakładają, że w środowiskach bardzo gęstych są one niszczone przez ruchy termiczne otoczenia. My obserwujemy efekty kwantowe w temperaturach stosunkowo wysokich, na dodatek w środowiskach skondensowanych: cieczech i kryształach. Otrzymane przez nas wyniki powinny więc być przestrożą dla chemików czy fizyków lubiących nadmiernie proste interpretacje”.

Imitowanie klasycznej fizyki przez zjawiska kwantowe, na dodatek w gęstym i stosunkowo ciepłym otoczeniu, to zaskakujący efekt, który powinien zwrócić uwagę m.in. konstruktorów nanomaszyn. Projektując coraz mniejsze urządzenia molekularne muszą oni zacząć zdawać sobie sprawę, że w trudnym do przewidzenia momencie mogą nieświadomie przejść ze świata fizyki klasycznej do świata zjawisk kwantowych. W nowych warunkach działanie nanomaszyn nagle mogłoby przestać być tak przewidywalne jak w przypadku np. mechanicznego zegarka.

Badania nad kwantowymi rotacjami grup atomowych w cząsteczkach sfinansowano ze środków Narodowego Centrum Nauki.

Informacja prasowa zrealizowana ze środków europejskiego grantu ERA Chairs w ramach programu Horizon 2020.

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 hab. **Piotr Bernatowicz**
Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie
tel.: +48 22 3433410
email: pbernatowicz@ichf.edu.pl

prof. dr hab. **Sławomir Szymański**
Instytut Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie
tel.: +48 22 3432203
email: slawomir.szymanski@icho.edu.pl

PUBLIKACJE NAUKOWE:

1. „Nonclassical dynamics of the methyl group in 1,1,1-triphenylethane. Evidence from powder ^1H NMR spectra”
A. Osior, P. Kalicki, B. Kamieński, S. Szymański, P. Bernatowicz, A. Shkurenko
The Journal of Chemical Physics 146, 104504 (2017)
DOI: 10.1063/1.4978226

POWIĄZANE STRONY WWW:

<http://www.icho.edu.pl/>
Strona Instytutu Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk.

<http://www.ichf.edu.pl/>
Strona Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk.

<http://www.ichf.edu.pl/press/>
Serwis prasowy Instytutu Chemii Fizycznej PAN.

<http://www.ichfdlafirm.pl/>
Oferta Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk skierowana do przedsiębiorców i przemysłu.

MATERIAŁY GRAFICZNE:

IChF170531b_fot01s.jpg

HR: http://ichf.edu.pl/press/2017/05/IChF170531b_fot01.jpg

Dr hab. Piotr Bernatowicz z Instytutu Chemii Fizycznej PAN i prof. dr hab. Sławomir Szymański z Instytutu Chemii Organicznej PAN wykazali, że efekty kwantowe mogą odpowiadać za pozornie klasyczne obroty grup atomowych w cząsteczkach. (Źródło: IChF PAN, Grzegorz Krzyżewski)