**Vědci z ÚOCHB předpovídají nový fyzikální jev díky pokročilému molekulárnímu modelování**

19. 5. 2025

**Výzkumný tým vedený prof. Pavlem Jungwirthem z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR zjistil, že během procesu, kdy se kapalina mění z nekovu na vodivý kov, vzniká ještě jeden, zatím nepopsaný jev. Jedná se o fázi, kdy se systém spontánně velmi rychle přepíná mezi kovem a nekovem, aniž by vydržel v jednom z těchto stavů delší čas. Úplně novou teorii podpírají pokročilé výpočty molekulárního modelování. Studie vzniklá ve spolupráci s Oxfordskou univerzitou, Matematicko-fyzikální fakultou UK a Ústavem fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, zaujala významný vědecký časopis Nature Communications.**

Pavel Jungwirth a jeho kolegové se věnují přechodu látek z nekovového do kovového stavu systematicky a řadu let. Vycházejí přitom z předpokladu, že mezi kovy nepatří jen materiály s pevným skupenstvím, ale také některé kapaliny. Jejich model, kdy přidávali alkalický kov, lithium, sodík nebo draslík, do kapalného amoniaku, až se z modrého elektrolytu stal zlatý kovový roztok, zaujal před pěti lety další metu vědeckého světa, časopis Science.

Z alkalického kovu se uvolňují elektrony a čím víc jich v roztoku je, tím víc se propojují, až vznikne tzv. vodivostní pás, tedy kov. Vědci z ÚOCHB vyvinuli metodiku, díky níž dokázali přerod nekovu v kov v kapalině nejen spočítat, ale také experimentálně ověřit na synchrotronovém urychlovači částic metodou fotoelektronové spektroskopie. Tento objev jim nyní umožnil, aby pomocí pokročilých výpočtů molekulové dynamiky přišli s novou hypotézou, a sice že neexistuje pouze nekov, nebo kov, ale také fáze, v níž se systém velmi rychle, během desítek femtosekund, přepíná mezi oběma stavy.

„*Zatím nikomu nedošlo, že se systém může převracet mezi kovem a nekovem na velmi rychlé časové škále. Tímhle způsobem zatím nikdo nepřemýšlel. Jedná se o nový fyzikální jev a my věříme, že naše (teoretické) závěry jsou dostatečně přesné,“* upozorňuje prof. Jungwirth.

Nyní se vědci snaží dokázat správnost svých výpočtů pomocí experimentu. Hledají pracoviště, které zvládne velmi rychlé přepínání mezi nekovem a kovem změřit.

*„Nebude to jednoduché, protože přepínání se děje velmi rychle, v řádech miliontin miliontiny vteřiny, nebo v ještě kratší době. Musíme se ptát, jak tento neobvyklý proces během pokusu pozorovat. Využít se pokusíme ultrarychlé lasery, jimiž disponují i některé laboratoře u nás v ústavu,“* vysvětluje první autor studie doktorand Marco Vitek.

Jestli se Jungwirthově týmu a jejich spolupracovníkům podaří výpočty experimentálně potvrdit, obohatí jejich zjištění vědu na pomezí fyziky a chemie o znalost nového fyzikálního jevu, který v učebnicích zatím chybí.

Původní článek: Vitek, M., Rončević, I., Marsalek, O. *et al.* Rapid flipping between electrolyte and metallic states in ammonia solutions of alkali metals. *Nat Commun* **16**, 4302 (2025). https://doi.org/10.1038/s41467-025-59071-z

**Ústav organické chemie a biochemie AV ČR / ÚOCHB** ([**www.uochb.cz**](http://www.uochb.cz)) je přední mezinárodně uznávaná vědecká instituce, jejímž hlavním posláním je základní výzkum v oblasti chemické biologie a medicinální chemie, organické a materiálové chemie, chemie přírodních látek, biochemie a molekulární biologie, fyzikální chemie, teoretické chemie a analytické chemie. Nedílnou součástí poslání ÚOCHB je přenos výsledků základního výzkumu do praxe. Důraz na mezioborové zaměření výzkumu ústí do řady aplikací v medicíně, farmacii a dalších odvětvích.

--- KONEC TISKOVÉ ZPRÁVY ---

**KONTAKT PRO NOVINÁŘE:**

Veronika Sedláčková (ÚOCHB – Komunikace): [**veronika.sedlackova@uochb.cas.cz**](mailto:veronika.sedlackova@uochb.cas.cz)

mob: +420 602 160 135