

## Co to je...?

(Přehled základních termínů)

### Kvantová chemie

Kvantová chemie je obor teoretické chemie, kdy kvantová mechanika je aplikována na problematiku struktury a fyzikálních vlastností atomů a molekul a především na problematiku fyzikálních a chemických procesů, které atomy a molekuly mohou podstupovat. Kvantová chemie nahlíží na atom jako na jádro mající tvar, strukturu a náboj, které je obklopené souborem elektronů, podobně pak na molekuly a molekulové fragmenty jako na soubory jader v prostředí elektronů, přičemž prostředkem k řešení problému je Schödingerova rovnice. S výjimkou nejjednoduššího atomu vodíku, kdy je řešena úloha dvou těles (proton a elektron), problém nemá analytické řešení. To nutí kvantovou chemii, aby používala celou řadu fyzikálních zjednodušení a aparát numerické matematiky, kdy fyzikální řešení jsou hledána iteračními metodami postupných korekcí. Jde tedy o speciální oblast teoretické chemie, která leží na rozhraní chemie a fyziky, kdy chemické pojmy a otázky jsou vysvětlovány pomocí fyzikálních kvantově mechanických představ. Z tohoto pohledu kvantová chemie principiálně dovoluje porozumění atomové a molekulové struktury, původu chemických vazeb, chemické reaktivity a dalších chemických pojmů na základě moderních fyzikálních teorií. Kvantová chemie, která dnes disponuje dostupnými komerčními programy, se díky obrovskému rozvoji výpočetní techniky stává velmi užitečným nástrojem v chemické analýze a ve vývoji chemických technologií. Pro molekulární inženýrství může mít v budoucnu kvantová chemie zásadní význam v tom, že požadované strukturně-chemické vlastnosti mohou být kvalitně odhadovány pomocí výpočtů bez provedení náročných a drahých chemických syntéz.

## Chemická fyzika

Chemická fyzika je obecně vědní obor, kdy fyzikální teorie a experiment je aplikován na chemické systémy nebo na řešení problémů, které jsou nebo mohou být předmětem zájmu chemiků. Takto definovaná chemická fyzika zahrnuje řadu podoborů, které se mohou navzájem velmi lišit. Příkladem může být fyzika pevné fáze, statistická termodynamika, molekulová fyzika (kvantová mechanika molekul), molekulární biochemie, kvantová chemie, termodynamika, molekulová symetrie, kinetická teorie plynů, spektroskopie, molekulární dynamika, relaxační procesy, fyzika iontů, volných radikálů, polymerů, nanočástic atd. Obory chemické fyziky jsou často studovány ve fyzikální chemii, v experimentální fyzice nebo jsou někdy považovány za samostatné odvětví chemie (kvantová chemie) či fyziky (fyzika pevných látek). Chemická fyzika je tedy obecné pojmenování pro řadu moderních oborů ležících na pomezí fyziky a chemie či biologie (fyzikální studium procesů jako fotosyntéza atp.).

Z hlediska potřeb ústavu analytické chemie a studijního oboru molekulárního inženýrství budou v centru zájmu především ty kapitoly chemické fyziky, které přímo souvisí se strukturou a reaktivitou molekul a molekulárních fragmentů, kde základními experimentálními technikami jsou spektroskopické metody a kde základním teoretickým aparátem jsou molekulová kvantová mechanika a chemická statistika. Tyto kapitoly chemické fyziky se do vysoké míry překrývají s moderním oborem chemie, který se na mnohých universitách označuje jako molekulární fyzikální chemie.

## Molekulární fyzikální chemie

Zatímco fyzikální chemie jako taková se zabývá makroskopickým popisem chemických dějů a fenoménů, přístup molekulární fyzikální chemie je jiný a zkoumá soubory konkrétních molekul a atomů, jejich možné interakce atp. Základním teoretickým aparátem je kvantová mechanika, kvantová chemie a chemická statistika, v experimentu klíčovou roli hrají spektroskopické techniky. Molekulární fyzikální chemie například z energetických hladin molekul, které jsou získatelné analýzou spektrálních dat nebo kvantově chemickými výpočty, vytvoří partiční funkce a z těchto pak může počítat termodynamické vlastnosti celého systému, jako jsou entalpie, entropie, rovnovážné konstanty, tepelné kapacity atp. Molekulární fyzikální chemie je teprve rozvíjející se obor a ve velké míře se překrývá s vybranými kapitolami chemické fyziky.

## Molekulová symetrie

Molekulová symetrie je fenomén, který nesouvisí jen s prostorovým uspořádáním atomů v molekule, ale má hlubokou souvislost se spektrálními charakteristikami molekul, s existencí či neexistencí kvantových stavů, s dovoleností a zakázaností kvantových procesů a podobně, a v této souvislosti lze pomocí molekulové symetrie diskutovat řadu molekulových vlastností. Moderní teorie symetrie molekul se opírá o matematickou teorii grup, která dovoluje získávat přesné kvalitativní výpovědi o molekulách a chemických reakcích na základě naprosto elementárních výpočtů.

Pojem symetrie aplikovaný na kvantově mechanické vlnové funkce kvantových stavů molekul a atomů vede k nesmírně důležitému zobecnění Pauliho principu, kdy se uplatňuje další kvantově mechanický fenomén: spin jader a elektronů. Podle kvantového čísla spinového momentu hybnosti (spinu) lze dělit elementární částice na bosony ( $I=0$  nebo sudému násobku  $\frac{1}{2}$ ) a fermiony (lichý násobek  $\frac{1}{2}$ ), přičemž toto dělení předurčuje řadu fyzikálně chemických vlastností molekul, odlišné statistické vlastnosti využívání prostoru částicemi. Zatímco hodnota kvantového čísla spinu elektronů je  $\frac{1}{2}$  a jde o fermion, v případě jader tato čísla nabývají jak hodnot 0, 1, 2 atp., (bosony), tak i hodnot  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{3}{2}$ , ... atd. (fermiony). To znamená, že i nepatrná změna jednoho jádra za jiný isotop může výrazně ovlivnit vlastnosti molekuly.

## Supramolekulární chemie

Supramolekulární chemie je mezioborová disciplína, která se zabývá přípravou a vlastnostmi komplexních molekulárních systémů, ve kterých důležitou roli hrají nekovalentní interakce mezi molekulami, které lze běžně pozorovat v řadě biologických procesů (při tvorbě fosfolipidové dvojvrstvy nebo při translaci a transkripci DNA). Otevírá se tím možnost přípravy uspořádaných molekulárních komplexů, které obvykle nelze připravit běžnými metodami organické chemie dosáhnout. Vedle kovalentních vazeb se při přípravě těchto molekulárních komplexů využívají vodíkové vazby, koordinační vazby, hydrofobní interakce,  $\pi$ - $\pi$  interakce a jiné slabé interakce.

Supramolekulární chemie se uplatňuje při tvorbě uspořádaných monovrstev molekul, při selektivním interakci mezi molekulami (molekulárnímu rozpoznávání), při rychlé přípravě molekul pomocí molekulárních knihoven apod.

## Molekulární inženýrství

Termínem „molekulární inženýrství“ se často označuje cílené zhotovování funkčních zařízení miniaturních rozměrů a případně tvorba nových materiálů cílenými manipulacemi s jednotlivými atomy a molekulami. Často jde v této souvislosti o tvorbu nových typů molekul či molekulárních zařízení, která v přírodě sama bez lidského intelektu nevznikají. Tyto systémy jsou tvořeny v nesmírně malých rozměrech, řádově nanometrech, přičemž při jejich návrhu, výpočtu či přípravě jsou aplikovány poznatky kvantové chemie, chemické fyziky, molekulární fyzikální chemie a supramolekulární chemie. Vedle zcela nových materiálů jsou tvořeny či je uvažována tvorba i takových systémů, které jsou známé z našeho „makrosvěta“, jakými jsou např. elektronické součástky (vodiče, diody, tranzistory). Jelikož většina zmiňovaných experimentů probíhá v rozměrech od jednotek do stovek nanometrů, mluví se o často v této souvislosti o nanotechnologii.

## Nanotechnologie

Pod souhrnný název nanotechnologie se zahrnují všechny postupy zahrnující tvorbu a manipulaci s objekty o velikostech jednotek až stovek nanometrů. Je tedy zřejmé, že termíny molekulární inženýrství a nanotechnologie se do značné míry kryjí. Jde o myšlenkové a fyzikální přístupy, které nám zpřístupňují zcela novou oblast materiálů. Příkladem mohou být uhlíkaté nanotrubky objevené před necelými 20 lety. Vedle čistě technologických postupů, jakými jsou nanolitografie pomocí paprsku fotonů, elektronů nebo iontů se uplatňují i techniky mikroskopie s rastrovací sondou umožňující jak manipulace s jejich jednotlivými částmi (přenos z místa na místo nebo litografické postupy), tak i analýzu nanoobjektů (od kvantových teček a molekulárních klastrů po samoskladné monovrstvy). Nanotechnologické postupy, ve kterých nad ryze technologickým přístupem převažuje přístup chemický, reprezentují metody používané v supramolekulární chemii; zde lze zmínit např. spontánní tvorba uspořádaných souborů molekul (samoskladné monovrstvy, koordinační polymery apod.).