

Pavel Hobza má díky novému objevu velkou šanci znovu přepsat učebnice fyzikální chemie

26.5.2023 - | Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava

Tým Pavla Hobzy v původní práci popsal nepravou vodíkovou vazbu X-H...Y. Ta se neprojevovala očekávaným červeným posunem (posun k nižším frekvencím) vibrační frekvence vazby X-H, která se podílí na vodíkové vazbě, ale naopak, modrým posunem (posun k vyšším frekvencím). V nové studii publikované v časopise Journal of the American Chemical Society vědci navrhnou nové zpřesnění a zjednodušení definice vodíkové vazby. Kromě protonické vazby by do ní na základě jejich výzkumu měla nově přibýt i hydridická vodíková vazba.

„Současná definice vodíkové vazby vychází z našeho objevu nepravé vodíkové vazby, která se vyznačovala modrým, a nikoliv očekávaným červeným posunem vibrační frekvence vazby X-H. Naše nedávné studie jdou ještě dál. Ukázaly, že vodíková vazba se tvoří i v případě hydridického a nikoliv pouze protonického vodíku. Navrhujeme proto upravit stávající definici vodíkové vazby tak, aby zahrнула všechny typy vazeb,“ vysvětluje profesor Pavel Hobza.

Voda se známým vzorcem H_2O je velmi jednoduchá molekula tvořená kyslíkem a dvěma atomy vodíku, přičemž vodík je nejlehčí ze všech existujících prvků vůbec. Za fakt, že voda teče v kapalném stavu z kohoutku a že varu dosahuje při teplotě 100 °C je zodpovědná tzv. vodíková vazba. Ta vzniká mezi vodíkovým atomem jedné molekuly vody a atomem kyslíku druhé molekuly. Jedná se o tzv. nekovalentní interakce, díky nimž drží pohromadě dvoušroubovice DNA a které se nacházejí ve všech proteinech či enzymech. Vodíková vazba tedy hraje naprosto zásadní a nepostradatelnou roli ve většině chemických a prakticky ve všech biochemických procesech na planetě.

Většina prvků v periodické tabulce má nižší elektronegativitu, tedy schopnost k sobě přitahovat elektrony než vodík. Pouze několik prvků (např. uhlík, dusík, kyslík, halogeny) má elektronegativitu vyšší. Ve zmíněné molekule vody k sobě přitahuje kyslík elektrony z vodíku a ten se pak stává částečně kladně nabitým. Pokud se v blízkosti kladně nabitého vodíku ocitne molekula obsahující prvek, který má elektronů nazbyt a může se o ně podělit, např. kyslík nebo dusík, vznikne protonická vodíková vazba. Přitom se oslabí a prodlouží vazba mezi vodíkem a elektronegativnějším atomem. Takové prodloužení se projeví zmenšením vibrační frekvence této vazby, tzv. červeným posuvem měřitelným infračervenou spektrometrií. Chemická vazba se vlastně chová jako struna a jejím prodloužením se sníží frekvence, a naopak zvýší vlnová délka směrem k červené části spektra. Podobný jev známe ze hry na kytaru, kde lze měnit výšku tónu právě zkracováním a prodlužováním struny na hmatníku.

V určitých případech ale může vazba mezi vodíkem a elektronegativnějším prvkem naopak zesílit, což se projeví zvýšením její vibrační frekvence, tzv. modrým posunem. V takovém případě mluvíme o už zmíněné nepravé vodíkové vazbě. Tedy o původním objevu Pavla Hobzy.

Pokud se ovšem atom vodíku naváže na prvek s nižší elektronegativitou, bude vodík najednou nabitý záporně. Pavel Hobza a jeho kolegové zkoumali nově konkrétně trimethylsilan, Me_3Si-H , kde je atom vodíku navázaný na méně elektronegativní atom křemíku a nese tudíž záporný náboj, a to v komplexech s různými elektronově chudými molekulami. Vazbu, jež v takovém případě vzniká, nazvali vědci hydridickou vodíkovou vazbou.

Pomocí výpočetních metod došli k tomu, že za popsáných okolností kovalentní vazba mezi křemíkem a vodíkem oslabí a prodlouží se, zatímco její vibrační frekvence se sníží. Dojde tedy k červenému posunu, stejnému, jak ho známe z protonické vodíkové vazby. Výpočty prováděli na ostravském superpočítači v IT4Innovations, uvedený předpoklad však bylo nutné potvrdit experimentálně.

Autoři experimentálně prokázali tento červený posuv u hydridické vodíkové vazby jako první na světě. Použili k tomu infračervenou spektrometrii za nízkých teplot. Tím se jim podařilo doložit, že hydridická vodíková vazba se projevuje zcela analogicky jako protonická vodíková vazba.

Díky tomuto objevu nastal čas na úpravu stávající definice vodíkové vazby. Zůstává otázkou, je-li nutné pro takovou vazbu zavádět definici úplně novou, nebo spíš upravit tu stávající. Autoři považují za vhodnější druhou cestu a v závěru publikace v *Journal of the American Chemical Society* navrhnou nové znění definice, aby zahrnovala oba typy vodíkové vazby, tedy jak protonickou, tak i hydridickou.

Původní článek: Civiš, S.; Lamanec, M.; Špirko, V.; Kubišta, J.; Špet'ko, M.; Hobza, P. Hydrogen Bonding with Hydridic Hydrogen-Experimental Low-Temperature IR and Computational Study: Is a Revised Definition of Hydrogen Bonding Appropriate? *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 8550-8559.

<https://www.it4i.cz/o-it4i/infoservis/tiskove-zpravy/pavel-hobza-ma-diky-novemu-objevu-velkou-sanci-znovu-prepsat-ucebnice-fyzikalni-chemie>