

Změřen čas štěpení kationtu silanu po fotoionizaci

23.7.2025 - Jan Kříž | Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Fragmentace molekul silanu hraje důležitou roli při plazmatických procesech, díky nimž vznikají vysoce čisté křemíkové vrstvy při výrobě fotovoltaických článků nebo moderních tranzistorů. Mezinárodní tým s účastí Víta Svobody z Ústavu fyzikální chemie VŠCHT Praha nyní dokázal díky unikátnímu experimentu a pokročilým teoretickým výpočtům molekulové dynamiky popsat časový vývoj kationtu silanu po fotoionizaci. Kromě zmíněných průmyslových aplikace umožňuje porozumění ultrarychlým procesům, jako je tento, lépe pochopit základní chování molekul a principy chemické fyziky. Studii zveřejnil respektovaný magazín Nature Communications.

Molekulární symetrie je klíčovým parametrem určujícím stabilitu i chemické vlastnosti látek. Vysoce symetrické molekuly, jako je silan, po ionizaci často během Jahn-Tellerovského štěpení rozkládají na fragmenty. Doposud však chyběly přímé experimentální důkazy o čase, v němž se tyto změny odehrávají.

Mezinárodnímu týpu se podařilo změřit pomocí krátkých pulzů (délka trvání pulzů <1 fs) v rentgenové oblasti časově rozlišený průběh Jahn-Tellerovského štěpení kationtu silanu. V rámci experimentu nejprve infračervený pulz ionizoval molekuly v plynné fázi. Průběh reakce vědci sledovali tak, že časově zpožděným rentgenovým pulsem měřili absorpční spektra vznikajících produktů reakce. Výsledná 3D spektra poskytla informaci o absorpci v závislosti na čase reakce a energii daného absorpčního pásu.

„Abychom rozluštili všechny detaily obsažené ve změřených spektrech, celou fotoionizační reakci jsme simulovali pomocí pokročilých teoretických výpočtů,“ říká doktor Svoboda s tím, že prakticky okamžitě po ionizaci kationtu silanu dojde v důsledku symetrie k otevření dvou možných reakčních cest.

„První cestou je disociace kationtu silanu na SiH_3^+ , která se děje bez energetické bariéry a trvá 23 fs. Druhou cestou, která je vůči první cestě o 11 fs opožděná, je stochastický rozpad kationtu silanu na SiH_2^+ a H_2 , který trvá 140 fs. Z pohledu chemické dynamiky je zajímavé to, že jak molekula silanu vibrovala před ionizací, se otiskne do vibrační paměti SiH_3^+ fragmentů, ale nikoliv do SiH_2^+ fragmentů,“ vysvětluje doktor Svoboda, který se nedávno vrátil na VŠCHT, kde zakládá vlastní výzkumnou skupinu s podporou grantu GA ČR Junior Start a Fondu Dagmar Procházkové. Předtím působil na ETH v Zurichu, kde získal doktorát, Institutu Maxe Borny v Berlíně a na výzkumném institutu JILA (spojené laboratoře University of Colorado Boulder a NIST).

Jak vědci doufají, jejich výsledky publikované v Nature Communications mohou v blízké budoucnosti přispět k optimalizaci průmyslových postupů a vyšší kvalitě polovodičových materiálů, ale také k hlubšímu pochopení ultrarychlé dynamiky molekul po jejich fotoionizaci.

Název: *Attosecond X-ray spectroscopy reveals the competing stochastic and ballistic dynamics of a bifurcating Jahn-Teller dissociation*

Publikováno v: *Nature Communications*, 2025

DOI: 10.1038/s41467-025-61512-8

<https://www.vscht.cz/novinky/zmeren-cas-stepeni-kationtu-silanu-po-fotoionizaci>