

Jak ve vodě vznikají pomalé elektrony

16.9.2025 - Jan Kříž | Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Kvůli interakci vysokoenergetického záření a vody vznikají v živých organismech částice a pomalé elektrony, které posléze ničí další molekuly, například DNA. Profesor Petr Slaviček se svým bakalářským studentem Jakubem Dubským (oba z VŠCHT Praha) nyní detailně popsali jeden z nedávno odhalených způsobů vzniku pomalých elektronů ve vodě, tzv. mezimolekulární coulombovský rozpad. Jejich matematický model dokázal vysvětlit všechna data v laserových experimentech provedených na univerzitě ETH v Curychu. Výsledky práce zveřejnil časopis Nature Communications.

Základní poznání dějů v roztocích společně s rozvojem výzkumných technologií využívajících vysokoenergetické záření zcela mění pohled na radiační chemii. To může do budoucna přinést významnou změnu v různých oblastech včetně lékařství, zejména s ohledem na citlivější a ovladatelnější využití přístrojů založených na ionizačním záření.

Mezimolekulární coulombovský rozpad (ICD, z angl. *Intermolecular Coulombic Decay*) byl experimentálně poprvé prokázán zhruba před 15 lety, všechny experimenty nicméně doposud probíhaly na izolovaných molekulách nebo maličkých shlucích vody. Tým profesora Slavička nyní zkoumal a vysvětlil děj ICD v reálné vodě.

„Náš model predikuje všechna data, která přístroje v náročných experimentech dokážou naměřit. Tím pádem mu můžeme věřit i tam, kam přístroje zatím nedohlédnou, a můžeme vysvětlit, co se po vystavení vysokoenergetickému záření děje v roztoku,“ říká profesor Slaviček.

Kromě objasnění samotného děje jsou zcela nová i zmíněná měření, která provedli vědci z ETH v Curychu. *„Měřit elektrony vylétající v rámci ICD v roztoku je opravdu velmi složité, protože elektron po ozáření typicky zůstane (na rozdíl od plynné fáze) uvnitř roztoku a nedostane se ven. Vyčíst z dat, co se uvnitř reálně děje, dokáže málokdo,“* oceňuje kolegy profesor Slaviček.

Stochastický model je založen na vstupech z kvantové mechaniky, které je ale možné v dostupném čase spočítat jen pro omezené systémy, typicky samostatné molekuly vody či jejich malé shluky. Tyto vstupy v kombinaci s výsledky experimentálního měření jsou následně rozvinuty v rámci pravděpodobnostních modelů a přinášejí celkový obraz ICD. Stochastické modely obecně pracují s několika náhodnými složkami a přibližují se reálným dějům, ve kterých je nahodilá složka obvykle přítomná. Výsledek neodpovídá reálné situaci zcela přesně, ale vždy s určitou **pravděpodobností**.

Autorem publikovaného stochastického modelu je mladý student Jakub Dubský, který aktuálně dokončil na VŠCHT bakalářské studium a chystá se pokračovat v navazujícím magisterském studiu na Oxfordu. *„Je mimořádné, když začínající student odevzdá práci na úrovni doktoranda v podobě reálného a fungujícího produktu, přinášejícího zcela nové poznání,“* říká profesor Slaviček.

Intermolecular Coulombic decay in liquid water competes with proton transfer and non-adiabatic relaxation

<https://www.vscht.cz/novinky/110091>