

---

# Jak vzniká kov - vědci z matfyz v Science

---

## Jak vzniká kov? Na výzkumu z titulky Science se podíleli i vědci z matfyzu

**Ondřej Maršálek, Kryštof Březina a Tomáš Martinek** tvoří výpočetní jednotku, která se podílela na mezinárodní [studii](#), na kterou poutala i titulní strana prestižního časopisu Science. Spolu s vědci z Ústavu organické chemie a biochemie Akademie věd ČR (ÚOCHB), Los Angeles a Berlína detailně zmapovali proces, jak se z nekovové látky stává kov. Co tomu předcházelo a jak takový výzkum vůbec probíhá?



Definice kovu říká: Kov je charakterizován volnými elektrony, které způsobují jeho velkou elektrickou vodivost. Jak ale vzniká? Právě to se podařilo po experimentální i výpočetní stránce objasnit vědcům z týmu prof. Pavla Jungwirtha z dejvického ÚOCHB a ze skupiny doktora Ondřeje Maršálka z Matematicko-fyzikální fakulty UK ve spolupráci s kolegy z USA a Německa. S využitím fotoelektronové spektroskopie a pokročilých numerických výpočtů popsali zrod kovového

roztoku alkalických kovů v amoniaku z původního elektrolytu. „Pomocí molekulární dynamiky jsme numericky počítali, jak se během extrémně krátkých časových úseků systém vyvíjí na molekulární úrovni a jaké zaujímá za dané teploty struktury,“ říká Ondřej Maršálek.

#### **Jak to celé začalo?**

„Podnětem byl slavný školní experiment, kdy hodíte sodík do vody a ono to vybuchne,“ vysvětluje Kryštof Březina. „Kolega Phil Mason tento výbuch čistě ze zájmu a pro svá popularizační videa na YouTube začal natáčet na vysokorychlostní kameru a už na tomto záznamu pozoroval vznik modré barvy solvatovaných elektronů ve vodě,“ popisuje podnět k serióznímu výzkumu Kryštof. Změna vodního prostředí za amoniak byl jen nástroj, jak celou reakci studovat. Solvatované elektrony jsou totiž v amoniaku, na rozdíl od vody, dlouhodobě stabilní. „Ukázalo se, že kombinace alkalických kovů s amoniakem nabízí zcela jiné možnosti a reakce než známá školní reakce ve vodě. Například lze pozorovat zvyšující se koncentraci iontů, která dává vzniknout zlaté barvě roztoku,“ komentuje dr. Maršálek.

Video, které celý výzkum popisuje:

#### **Experimenty versus výpočty**

Experimenty a výpočty se vzájemně doplňují. „Potřebujeme se navzájem. Experiment je nutně partner výpočtů a vždy je potřeba najít co nejvíce styčných bodů mezi otázkami, na které může dát odpovědi pouze experiment nebo naopak pouze výpočet,“ popisuje Ondřej Maršálek.

Experiment například snadněji poskytne data o různých teplotách a koncentracích. Numerické výpočty mají zase větší rozlišení v čase a prostoru, a to v extrémních detailech: „My se na studovaný systém díváme jako přes velikou lupu – až na úroveň atomů a v řádu femtosekund,“ vysvětluje teoretický fyzik Kryštof Březina.

- **Sázka o dva elektronvolty**

*„Z předchozích studií a měření na jednodušších systémech byly mé odhady, že energie odpovídající elektronům rozpuštěným v tekutém amoniaku bude spíše nižší hodnoty. Naopak Pavel Jungwirth odhadoval, že energie bude výrazně vyšší. Tak jsme se vsadili o pivo, zda to bude nad nebo pod 2 elektronvolty,“ popisuje sázku Tomáš Martinek. Jak to dopadlo? Remízou – výsledek je 2 elektronvolty.*

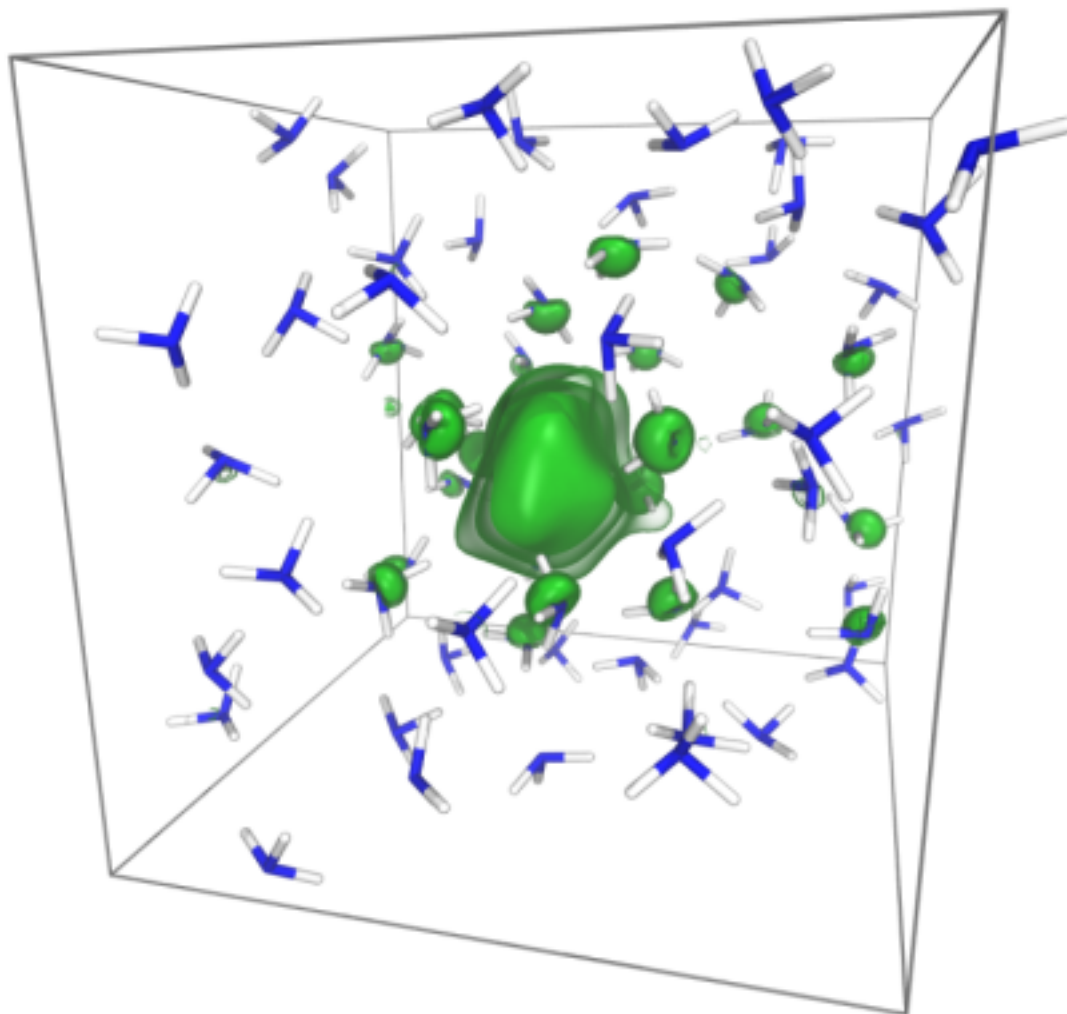
Ani nelze říci, že by jedno předcházelo druhé. „Někdy jsme s výsledky byli více napřed my s výpočty, jindy experimentátoři. Je ale pravda, že experimentátoři získávali výsledky skokově. Vždy dlouho přemýšleli, plánovali, co a jak budou měřit, pak jeli na synchrotron, týden nespali a náhle měli mnoho výsledků (směje se). My jsme pracovali více průběžně,“ popisuje vedoucí výpočetní podjednotky Ondřej Maršálek.

- **Zážitky ze synchrotronu**

*Kryštof Březina se i jednou účastnil měření na synchrotronu v Berlíně: „Čas na synchrotronu je velmi vzácný a drahý, proto se měří na dvě směny, 24 h. Celý ten experiment a aparatura vypadá velmi jednoduše, ale docílit toho, aby to fungovalo, to byl unikát. Vznikl o tom samostatný článek,“ popisuje. „Můj podíl na experimentech, protože jsem teoretik, byla likvidace mraženého amoniaku po měření – v jednom experimentu získáte cca půl kila „amoniakové zmrzliny“. Což byla hrozná práce, protože je to jedovaté, dusivé a extrémně to smrdí, nicméně je to stejně důležitá součást experimentů jako samostatné měření. Nevyhnulo se to ani Pavlovi Jungwirthovi, který je také teoretik,“ popisuje se smíchem. A přidává další vedlejší efekt měření na synchrotronu: „Mezi likvidací čpavku jsem hrál s kolegou šachy a výrazně jsem se zlepšil.“*

#### **„Však vy jen něco nastavíte na počítači.“**

Věta, kterou teoretičtí výpočetní chemici od laiků nebo kolegů experimentátorů přímo nesnáší. „I naše práce je experimentální, jen nemusíme mýt nádoby nebo chodit krmit myši,“ komentuje Kryštof Březina. Jejich práci lze rozdělit do tří částí. První je volba vhodného systému. „Na začátku se musíme ptát: Co chci zjistit? Budu mít dostatek dat? Dostanu z nich odpovědi na otázky, na které se ptám? Mám k tomu vhodné nástroje nebo dokážu je vytvořit? Nedílnou součástí prvního kroku je i hledání a nastavení parametrů. „To zahrnuje mnoho testovacích simulací, kdy zjišťujete vhodné parametry a odhalujete a napravujete chyby. A tak pořád dokola. Je to velmi kreativní část,“ popisuje Tomáš Martinek. I výpočetní fyzici mohou zažít "výbuch" - tak označují výpočty, které nefungují. Při hledání chyb vědci vychází z předchozích zkušeností i z literatury.



Druhá část jsou výpočty počítačem. „Tam sice kromě průběžné kontroly není přímo potřeba lidská činnost, ale zase trvají dlouho. Ty levnější probíhají přímo na matfyzu, složitější-dražší výpočty putují do velkého počítačového centra v Ostravě,“ popisuje Tomáš Martinek. Levnější a dražší se ve výpočetní hantýrce myslí složitost výpočtu a ne cena ve smyslu peněz, ale tzv. jádrohodin – přiděleného času pro výpočet.

V posledním kroku následuje analýza dat, která vygeneroval počítač. „Z dat je potřeba získat informace. To může trvat klidně měsíc i více. Například ze 100 GB počítačem vygenerovaných dat ve výsledku musíte extrahovat pár čísel, která popisují křivku a objeví se v článku,“ uvádí na příkladu Ondřej Maršálek a dodává: „Výsledkem naší práce jsou matematické rovnice a čísla, ne barevné bubliny, které se hýbou. Ty slouží pouze pro vizualizaci.“



Výzkum z titulků Science

K výsledné publikaci vedla dlouhá cesta. „V tomto případě nešlo o žádné "wow, máme objev", ale spíše postupné získávání výsledků, které se skládaly dohromady jako puzzle,“ shodují se fyzici. Získat jeden výsledek molekulového modelování trvá i půl roku. I samotný publikační proces je dlouhý a nejistý.

„Dnes už v online systému můžete sledovat jednotlivé kroky – a tak jsme napjatě sledovali, jak editor článek nevyhodil hned, ale poslal to k recenzím, což nám dalo naději. Čekali jsme, dostali jsme recenze, museli jsme udělat řadu změn i nových experimentů a výpočtů. Revize nám trvaly tři měsíce a byla to velmi intenzivní práce. Ale měli jsme motivaci a naději, navíc podněty recenzentů naši práci ještě více zlepšily. Pak pošlete novou verzi opět k recenzím, znovu čekáte a stále nemáte jistotu, ale nakonec to vyjde,“ popisují celý proces „vědci z titulky“.

- **RNDr. Ondřej Maršálek, Ph.D.**

Působí jako vedoucí skupiny na Fyzikálním ústavu UK, Matematicko-fyzikální fakulta. Jako postdoktorand strávil dva roky na New York University a téměř tři roky na Stanford University. Od roku 2017 je zpět na Univerzitě Karlově.

- **Ing. Kryštof Březina**

Studuje první ročník doktorského studia na Fyzikálním ústavu UK, Matematicko-fyzikální fakulta.

- **Ing. Tomáš Martinek**

Pracuje ve skupině prof. Jungwirtha na ÚOCHB a dokončuje doktorské studium na VŠCHT v Praze.