

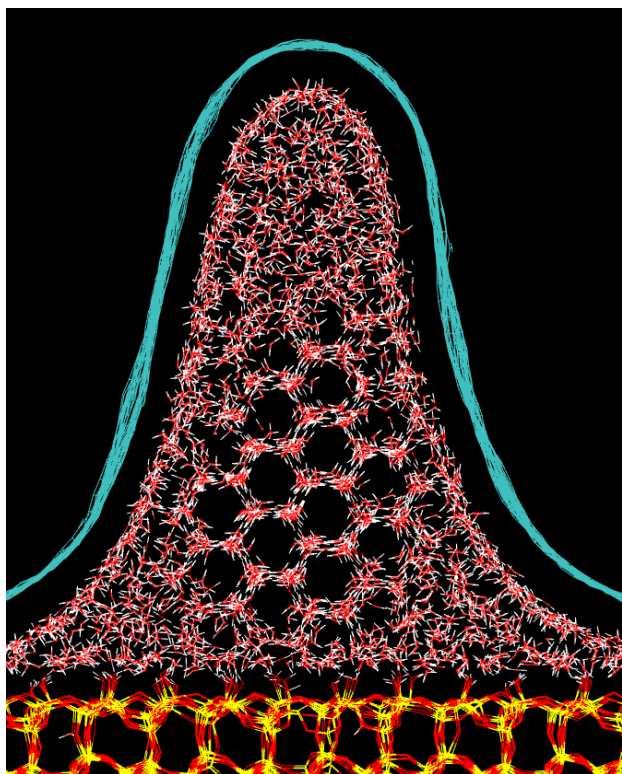
Mrznutí vody v nanoměřítku

Vedoucí projektu: doc. Mgr. Jiří Klimeš PhD

O vodním ledu víme, že taje při nula stupních Celsia. Nicméně to neplatí pro led, který je prostorově omezený na škále nanometrů. U takovýchto systémů může být teplota tání nižší až o desítky stupňů. Prostorově omezená voda je hojná, v přírodě se vyskytuje například uvnitř buněk. Přítomnost vody často ovlivňuje experimentální měření, jelikož je obtížné se jí zbavit. Příkladem je práce [1] ve které jsme studovali rozhraní grafenu a křemičitanu (Obr. 1). V tomto případě mrznutí a tání ledu ovlivňovalo naměřené vlastnosti grafenu a bylo možné vypočítat, kdy voda taje. Při počítačových simulacích tohoto procesu bylo problémem dosáhnout toho, aby voda zamrzla. Tato obtíž byla hlavně způsobena tím, že dynamika vody je při nízkých teplotách velmi pomalá a simulovaný systém obsahoval desítky tisíc atomů.

V projektu použijeme počítačové simulace a zjistíme teplotu tání pro neomezenou vodu a pro různé prostorově omezené modely, např. pro uhlíkové nanotrubičky různých průměrů. Dále otestujeme použití nukleačního jádra, kdy do vody přidáme již zmrzlý kousek ledu obsahující několik molekul. Pro výpočty použijeme programy, které se využívají pro simulace biomolekul.

[1]: T. Verhagen, J. Klimes, B. Pacakova, M. Kalbac, and J. Vejpravova *Anomalous Freezing of Low-Dimensional Water Confined in Graphene Nanowrinkles*, ACS Nano **14**, 15587 (2020)



Obr. 1: Snímek z počítačové simulace vody v nanotunelu zdola vymezeném vrstvou křemičitanu a z vrchu vrstvou grafenu [1].