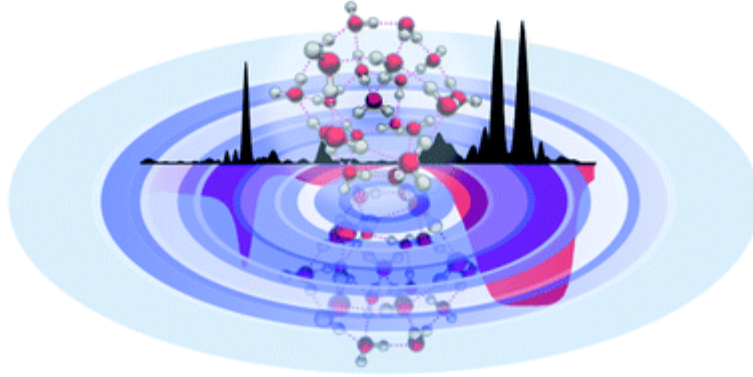


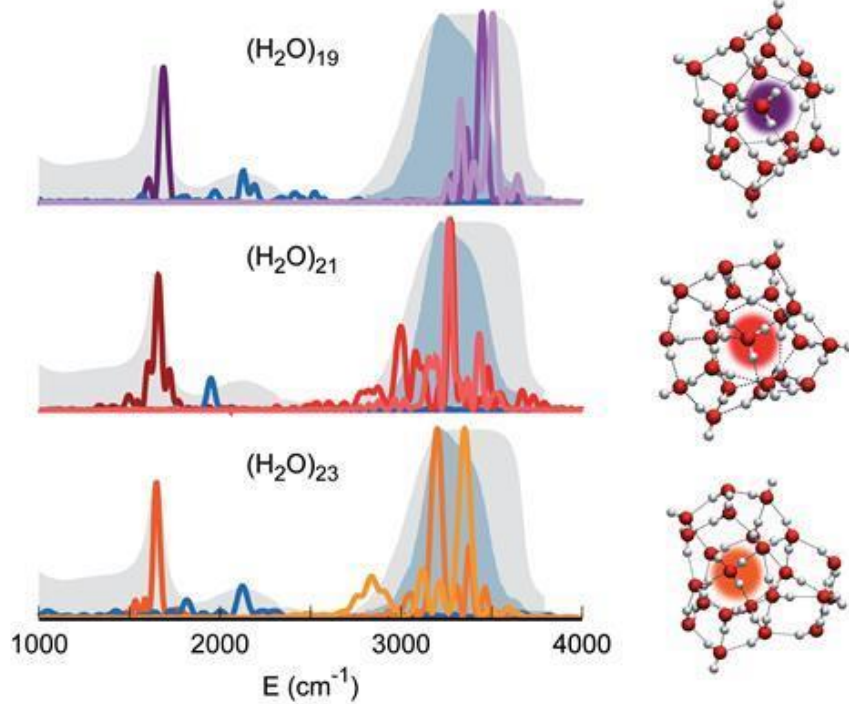
# BİR DAMLA SUDA KAÇ MOLEKÜL VAR?

**Kaynak:** Emma Lockyer, Chemistry World, 21 Ocak 2021

Hazırlayan: Mjgan İlter



İtalya'da arařtırmacılar bir damla su için kaç su molekül gerekli olduėunu tanımladılar. Milan niversitesi 'den, bu alıřmanın lideri Michele Ceotto derki :  
"Bulgularımıza gre **bir su molekül , 20 su molekül ile sarılınca - yani 21 molekül- bir bardak su imiř gibi ( su yıėını gibi) davranırlar ."**



G spektrumu; bklme, esneme ve kombin bklme- libransyon bandları  
stte (H2O)10                      ortada (H2O)21                      altta (H2O)23

Ceotto ve ekibi, quantum –sürümü yarı klasik spektroskopi kullanarak artan su kümesi miktarının titreşim Spektra simülasyonu ile ne zaman su yığınının eşdeğer olduğunu tanımladılar. Ceotto'nun açıklamasına göre, sadece birkaç molekül su ile çözülgen iki tabaka oluşur, sıvı sudaki 'vibrasyon fiziği' kazanılmaktadır". Suyu basit bir anlatım ile her bir molekül hidrojen bağının iki vericisi ve iki alıcısı olduğu şeklinde düşünülebilir. Ve herne kadar Ceotto'nun ekibinin bulguları tetrahedral koordinasyonun gerekli olduğunu gösteriyor olsada , yinede 'bulk -yığın suyun kendisinin reflektif- yansıtıcı olması yeterli değildir' diye belirtirler.

Almanya'da Bochum kentindeki Ruhr –Üniversitesi'nden Martia Havenith Neven su kümesini spektroskopi kullanarak inceledi. Ve fakat sürpriz olacak sonuçlar bulamadı. Neven şunları nelirtiyor: " Su tuhaf bir madde. Onu tanımlamakta gerçekten zorluk çekmekteyiz. Eğer iki yada üç su molekülü ile bir modele sahip olsaydınız, şurası kesin ki siz tam olarak bir yığını tanımlamış olamazdınız."

Ceotto'nun ekibi , vibrasyonel spektrumda geniş bir pik veren suyun kombin bandını inceleyecek quantum sürümü metod kullandılar. Bu sinyaller iki vibrasyonel modda, kombine durumunda elde edilen bir geçiş olduğu zaman bu sinyaller yükselir. Su konu olduğunda bu band , moleküldeki ileri- geri dönmenin librasyon hareketi ile – O-H bağının bükülmesi sonucu oluşmuştur. Klasik simülasyonlar bunları yeniden üretemez, fakat çalışmada, kümedeki merkez molekül için spektrumun bu parçasının yığın halindeki su ile elde edilenle aynı durumda olduğunun gösterilmesi, yani su molekülünün titreşim özelliğinin tüm boyutu ile yakalandığından emin olunması önemli bir sonuç oldu.

Ceotto bu çalışmanın sadece suyun özelliklerini keşfetmekten daha fazla olabileceğini ümit etmektedir: "Bu sadece kuantum kuralı gerektiren elektriksel bir hareket değildir; Bunun aynı zamanda doğru olarak nükleer hareketi tanımlamak için kuantumun mekanik etkilerini de içeriyor olması gereklidir. Benim esas amacım, topluluğa herkese, kuantum etkileri ve hassas moleküler mekanikleri tanımları da içeren güçlü bir **moleküler dinamikler protokolü** sağlamaktır."

Ekibin gelecekteki araştırmaları makro moleküllerin kuantum kuralınca nükleer tanımı üzerine olacaktır.