



Što se događa u trenutku sudara? Znanstvenici prvi put pokazuju kako udarci u mlinu pokreću kemijske reakcije

Zagreb / Erlangen, 6. veljače 2025. – Mehanokemija, koja kemijske reakcije pokreće mehaničkom silom, sve je češća u sintezi materijala i održivoj „zelenoj” kemiji. Provodi se naizgled jednostavno - mljevenjem kuglicama. Ipak, ono najvažnije, što se zbiva u samom trenutku sudara kuglica i čestica, ostajalo je izvan dosega izravnog promatranja. Novo istraživanje međunarodnog tima s Instituta Ruđer Bošković (IRB) i Sveučilišta Friedrich-Alexander Erlangen-Nürnberg sada donosi odgovor upravo na to pitanje i to na molekularnoj razini.

Kako bi saznali kako se odvijaju mehanokemijske reakcije te što se doista događa u trenutku sudara, istraživački tim pod vodstvom **dr. sc. Ane Sunčane Smith** i **dr. sc. Ivana Halsza** s IRB-a razvio je protokol računalnih molekulsko-dinamičkih simulacija koji omogućuje da se sudar kuglice i čestice promatra poput ekstremno usporene snimke. Izračunima provedenima na **superračunalu Supek** na SRCU uspjeli su promatrati kako mehanički udar pretvara čvrstu tvar u kemijski reaktivne „građevne blokove“ te dodatno utvrditi zašto prisutnost male količine vode može pomoći reakciji, ali previše vode može imati suprotan učinak.

Ovi su **rezultati važni jer otvaraju put preciznijem planiranju mehanokemijskih reakcija**, od jačine i geometrije sudara do ciljane upotrebe tekućih dodataka. Dugoročno, to znači **veću učinkovitost, manju potrošnju energije i manje otpada u industrijskim i istraživačkim procesima**. A da je riječ o iznimno važnim rezultatima potvrđuje i činjenica da su urednici časopisa **Angewandte Chemie International Edition** istaknuli [ovaj rad](#) na [naslovnici časopisa](#).

Sudar koji „razbudi” kemiju

U istraživanju su znanstvenici uzeli jednostavan „modelni par” običnu kuhinjsku sol kalija, odnosno kalijev klorid (KCl) i 18-kruna-6 eter koji je poznat kao svojevrsni „molekularni prsten” jer u svoju šupljinu hvata ion kalija tvoreći stabilan kompleks.

„Na modelnom sustavu KCl i 18-kruna-6 etera pokazali smo da reakcija započinje tek kada sudar prenese dovoljno energije da razbije ionsku kristalnu rešetku. Kada energija apsorbirana u sudaru, po ionskom paru, premaši kohezivnu energiju kristala, dolazi do fragmentacije i nastaju pojedinačni ioni. Naši rezultati jasno pokazuju da mehanička aktivacija nije kontinuirani proces, nego ovisi o tome je li tijekom sudara dosegnut energetski prag potreban za fragmentaciju“, objašnjava dr. sc. **Ana-Sunčana Smith**, dopisna autorica na radu s IRB-a.

Drugim riječima, istraživanje jasno pokazuje da mehanokemijska reakcija ne počinje postupno, nego tek kad udar dosegne određeni prag, odnosno kada snažan udar razbije kristal, poput soli, na vrlo sitne dijelove. Takva fragmentacija stvara kratkotrajno, ali izrazito reaktivno stanje u kojem ioni stupaju u



interakciju s okolnim molekulama prije nego što se sustav stabilizira. Reakcija mljevenjem stoga se ne odvija neprekidno, već „u skokovima“ tako da svaki novi dovoljno snažan sudar omogući daljnji mali napredak reakcije. To objašnjava zašto je za uspješno provesti reakciju mljevenjem potrebno stalno i dugotrajno udaranje kuglica.

Mala kap vode, velika razlika

Posebno zanimljiv dio istraživanja odnosi se na vodu kao tekući dodatak. Kemičari već dugo znaju da mala količina tekućine u mlinu često ubrza mehanokemijske reakcije, ali objašnjenje zašto je tomu tako, nije uvijek bilo jasno.

„Simulacije u ovom radu pokazuju nelinearan učinak količine vode, a to je da u maloj količini olakšava nastanak kompleksa između kalijevih iona i 18-kruna-6, dok u prevelikoj količini stabilizira reaktante i onemogućava nastajanje kompleksa“, kaže dr. sc. **Ivan Halasz**, dopisni autor na radu i voditelj Laboratorija za sintezu i katalizu u čvrstom stanju na IRB-u.

Novi alat za racionalno dizajniranje mehanokemije

Znanstvenici naglašavaju da njihov pristup ne pokušava doslovno oponašati cijeli proces mljevenja u laboratorijskom mlinu, već se fokusira na ono presudno, a to je pojedinačni sudar i posljedice koje on ostavlja na molekularnoj razini. Autori vjeruju da upravo to otvara prostor za racionalnu optimizaciju i za bolje „upravljanje“ reakcijom koja se do sada često oslanjala na iskustvo i sistem pokušaja i pogrešaka.

“Ovo je novi i do sad jedinstveni pristup koji pomaže razumjeti kratkotrajne, neuobičajene uvjete koje stvaraju udarci kuglica u mlinu i poslužiti će dubljem razumijevanju mehanokemije te kao vodič za pametniji odabir i doziranje tekućih dodataka u reakcijama mljevenjem,” zaključuju autori.

Rad „**Deciphering Ball Milling Mechanochemistry via Molecular Simulations of Collision-Driven and Liquid-Assisted Reactivity**“ objavljen je u časopisu *Angewandte Chemie International Edition*. Uz dr. sc. Anu-Sunčanu Smith i dr. sc. Ivana Halasza tim čine još dr. sc. Leonarda Vugrin s IRB-a te Rupam Gayen, dr. sc. Zehua Zhang, dr. sc. György Hantal sa Sveučilišta Friedrich-Alexander Erlangen-Nürnberg.

Istraživanje je provedeno uz financijsku potporu Njemačke zaklade za znanost i Hrvatske zaklade za znanost.

POVEZNICA NA RAD:

Deciphering Ball Milling Mechanochemistry via Molecular Simulations of Collision-Driven and Liquid-Assisted Reactivity, (Angew. Chem. Int. Ed. 50/2025) <https://doi.org/10.1002/anie.202505263>

POVEZNICA NA NASLOVNICU: [Outside Front Cover: Deciphering Ball Milling Mechanochemistry via Molecular Simulations of Collision-Driven and Liquid-Assisted Reactivity \(Angew. Chem. Int. Ed. 50/2025\)](#)