

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Adéla Kochanovská

K 50.výročí Lauova objevu difrakce rentgenových paprsků na krystalech

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 7 (1962), No. 3, 135--141

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/137243>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1962

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

K 50. VÝROČÍ LAUOVA OBJEVU DIFRAKCE RENTGENOVÝCH PAPRSKŮ NA KRYSTALECH

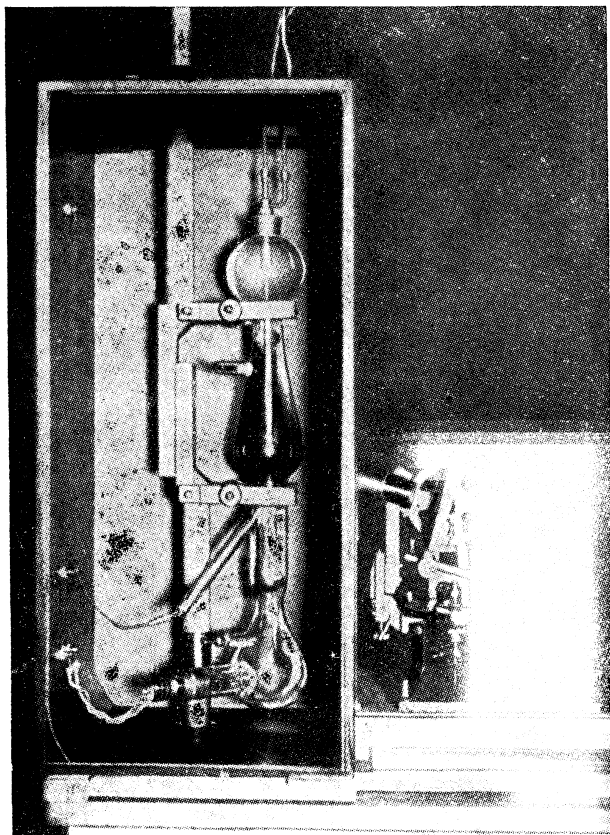
ADÉLA KOCHANOVSKÁ, Praha

8. června bude tomu právě 50 let, co MAX VON LAUE pronesl na zasedání Německé fyzikální společnosti přednášku o svém objevu interference rentgenových paprsků na krystalech. Přednášku proslovil ve Fyzikálním ústavu berlínské university, na témž místě, na němž v prosinci 1900 PLANCK prvně mluvil o svém vyzařovacím zákonu a kvantové teorii. Za tento svůj objev, kterým položil základ k celému studiu mikrofyzikální výstavby hmoty, byl Laue v r. 1915 vyznamenán Nobelovou cenou.

Je nesmírně zajímavé sledovat historii tohoto objevu; Laue ji sám vylíčil velmi výstižně ve své autobiografii. V době svého objevu působil M. Laue na universitě v Mnichově a stýkal se velmi těsně s předními fyziky, kteří tam působili. Kromě W. K. ROENTGENA pracoval tehdy na mnichovské universitě vynikající teoretik A. SOMMERFELD, který byl povolán několik let před tím na uprázdněnou katedru po BOLTZMANNOVI. Sommerfeld jako vysokoškolský učitel měl neobyčejný vliv na své posluchače a mladší spolupracovníky. Hlavní zájmy této skupiny se soustřeďovaly na problémy z oblasti teoretické optiky a na otázky vztahující se k rentgenovým paprskům, objeveným koncem r. 1895 W. K. Roentgenem, jejichž povaha byla tehdy ještě tajuplná. Sommerfeld sám zastával názor, že rentgenové paprsky jsou povahy vlnové, naproti tomu W. H. BRAGG v Anglii velmi energicky obhajoval korpuskulární teorii pro tyto paprsky. O tom, který z těchto názorů je správný, měly rozhodnout pokusy, které provedli WALTHER a POHL v Hamburgu s difrakcí rentgenových paprsků na klínových šterbinách. Ale efekt byl nepatrný (fotometricky jej proměřil P. P. KOCH, první Roentgenův asistent) a Sommerfeld podle něho mohl na základě teorie ohybu provést jen hrubý řádový odhad vlnové délky, která vycházela velmi malá. Sommerfeld později vypočetl teoreticky jejich možnou vlnovou délku vycházející z předpokladu, že rentgenové paprsky jsou elektromagnetické impulsy vznikající při zabrzdění elektronů na antikatódě rentgenové trubice. Jeho teoretický výpočet vedl k hodnotě 10^{-9} cm. Konečně v kolokviu, které Sommerfeld vedl, hovořil též o BARKLOVĚ důkazu polarizace rentgenových paprsků i o charakteristickém rentgenovém záření chemických prvků.

Atmosféra, ve které se Laue na mnichovské universitě pohyboval, byla tedy doslova nasycena problematikou týkající se zvláštní povahy rentgenových paprsků. Vedle toho však měla nesporně velký význam pro myšlenkový postup, který Laua

vedl k jeho objevu, i ta okolnost, že v Mnichově byla ještě živá tradice hypotézy prostorové mřížky krystalů. Ve sbírkách universitních ústavů se zachovaly ještě modely prostorových mříží krystalů z doby, kdy v Mnichově působil L. SOHNCKE, který sám podstatně přispěl k matematickému propracování této hypotézy, a mineralog, P. GROTH neopominul nikdy ve svých přednáškách se o ní zmínit.



Obr. 1. Aparatura pro LAUŮV pokus podle RINNEHO.

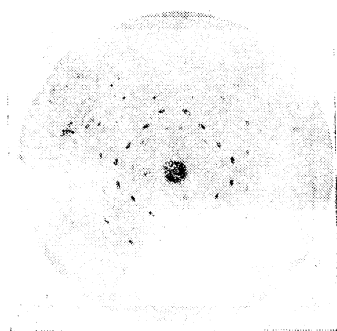
V té době, a to v únoru 1912, dostal P. P. EWALD, Sommerfeldův doktorand, za úkol vypracovat teorii průchodu světelných vln prostorovou mřížkou tvořenou polarizovatelnými atomy (dipóly). Za periodu mřížky byla vztata ve shodě s tehdejšími odhady atomových rozměrů veličina 10^{-8} cm. Ewald, který si z počátku s tímto úkolem nevěděl rady, navštívil Laua v jeho bytě a prosil ho o radu. A právě na této besedě s Ewaldem napadla Laua vynikající myšlenka spojení dvou měřitek — délky vlny rentgenových paprsků a vzájemné vzdálenosti atomů. Řekl Ewaldovi, že by se mělo jednou zkusit nechat procházet skrze krystaly kratší vlny, totiž rentgenové paprsky; tvoří-li atomy skutečně prostorovou mřížku, musily by vzniknout obdob-

né interferenční jevy jako světelné interference na optických mřížkách. O tomto Lauově nápadu se pak mluvilo a diskutovalo mezi mladými mnichovskými fyziky, kteří se pravidelně v neděli scházeli v kavárně Lutz. Jeden z nich, W. FRIEDRICH, který krátce předtím u Sommerfelda promoval práci o rozptylu rentgenových paprsků a hned nato se stal jeho asistentem, se nabídl, že Lauovu myšlenku experimentálně prověří. Sommerfeld se sice stavěl z počátku proti tomu, neboť jednak Lauově myšlence nevěřil, jednak chtěl, aby se Friedrich zaměřil na pokusy, jež měly sledovat směrové rozdělení rentgenového záření emitovaného z antikatody. Když se však přihlásil za pomocníka P. KNIPPING, Roentgenův doktorand, nakonec dal svůj

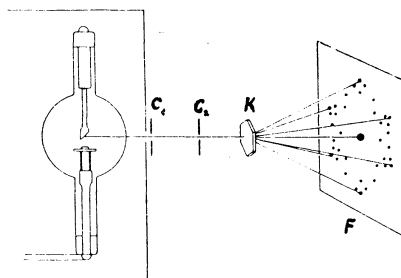
souhlas. A tak začaly experimentální přípravy krátce před velikonočními svátky 1912.

Experimentální úloha prověření Lauova nápadu se ukázala nesnadnou. Jak dnes víme, je koeficient atomového rozptylu rentgenových paprsků (atomový faktor) velmi malý, rentgenové trubice v tu dobu byly málo výkonné a snaha Friedricha a Knippinga co možno nejlépe vymežit svazek rentgenových paprsků určený pro průchod krystalem ještě dále podstatně zmenšila intenzitu. Prvý pokus se nepodařil, ale druhý měl úspěch. Transmisní snímek destičky krystalu síranu měďnatého získaný průchodem úzkého svazku paralelních rentgenových paprsků (obr. 1, 2) ukazoval kromě stopy od přímo prošlého primárního svazku soustavu skvrn pravidelně uspořádaných, odpovídajících difraktovaným svazkům a současně reprodukcujících souměrnost krystalu. To byl velký úspěch.

Myšlenka na matematickou teorii zachyceného difrakčního jevu napadla Lauovi, když se ubíral domů po zhlédnutí snímku, který mu Friedrich ukázal. Šťastnou náhodou právě nedávno formuloval nově teorii ohybu na lineární optické mřížce pro jeden článek v Encyklopedii matematických věd (Encyklopedie d. mathematischen Wissenschaften). Bylo-li tohoto postupu užito dvakrát, vystihovala teorie i ohyb na dvourozměrné mřížce (Kreuzgitter). Myšlenka použít ho třikrát podle tří period prostorové mřížky — známé tři Lauovy rovnice — pro vysvětlení pozorovaného difrakčního jevu byla tedy pro Laua nasnadě. A když o několik týdnů později se podařilo získat lepší a přehlednější snímek (obr. 3) — bylo použito krystalu Zn S, který má jednodušší strukturu —, ověřil si na něm tuto svoji teorii i kvantitativně. To bylo pro něho rozhodující a na základě toho pak teprve mluvil 8. června 1912 o svém objevu ve Fyzikální společnosti.



Obr. 3. Lauegram krystalu síranu zinečnatého (prozářeného ve směru hrany krychle) podle LAUA, FRIEDRICH A KNIPPINGA.



Obr. 2. Uspořádání pro LAUOVU metodu schematicky. Úzký svazek rentgenových paprsků vymezený soustavou clonek C_1 , C_2 , prochází krystalem K a na fotografickém filmu F dává vznik soustavě diskrétních skvrn, stopám difraktovaných svazků.

Historie objevu interference rentgenových paprsků jasně charakterizuje cenu vědecké hypotézy. Již dávno před pokusy Friedrichovými a Knippingovými, inspirovanými Lauem, řada fyziků nechala procházet rentgenové paprsky krystaly. Omezovali se však jen na pozorování paprsků přímo prošlých a o těch nemohli říci nic pozoruhodného vyjma toho, že při průchodu krystalem nastalo jejich zeslabení. Odchýlené difraktované paprsky unikly jejich pozornos-

ti pro značně menší intenzitu. Teprve hypotéza o prostorové mřížce krystalu vyvolala myšlenku, že je nutno sledovat právě tyto odkloněné paprsky. Jistě by byly objeveny i nezávisle na této hypotéze, patrně při použití silnějších rentgenových trubic, jež se objevily s pokrokem techniky. Nějaká náhoda by byla vedla později k jejich objevu. Je ovšem těžko říci, kdy by se to bylo stalo. Je možno jen s určitostí tvrdit, že idea prostorové mřížky byla nutná pro potvrzení vlnových vlastností těchto paprsků.

Pokus Lauův, Friedrichův a Knippingův rozřešil současně dvě důležité otázky: otázku o povaze rentgenových paprsků a otázku o výstavbě krystalů. U rentgenových paprsků byla nejen prokázána jejich elektromagnetická povaha, ale bylo nalezeno i jejich místo ve stupnici vlnových délek mezi ultrakrátkými světelnými paprsky a měkkými paprsky γ . U krystalů pak od toho okamžiku zmizely veškeré pochybnosti (a bylo jich tehdy nemálo) o diskrétní a periodické jejich struktuře.

Další vývoj už záležel pouze ve zpřesňování, získávání detailnějších údajů jednak o spektrech paprsků emitovaných rentgenovou trubicí, jednak o reálném rozmístění atomů v krystalech různých látek. Říkám „pouze“, avšak tyto dvě oblasti, rentgenová spektroskopie a určování krystalových struktur, se ukázaly téměř nevyčerpatelné; již 50 let jsou předmětem usilovného výzkumu mnoha tisíc výzkumných pracovníků ve stovkách laboratoří po celém světě.

Ihned po Lauově objevu se počal rozpracovávat v mnoha zemích problém difrakce rentgenových paprsků v krystalech. Prvé místo v těchto pracích zaujímají nesporně výzkumy W. H. a W. L. BRAGGŮ, kteří vypracovali v Anglii pozoruhodné metody na určování struktur krystalů. Tyto práce začínaly od určování struktur nejjednodušších látek, jako je např. kuchyňská sůl, vedly přes poměrně složité struktury sili-kátů až k velmi komplikovaným strukturám některých organických látek, zejména bílkovin. Tyto práce jsou všeobecně známé (zde se jimi nemůžeme podrobně zabývat, ač by si to jistě zasloužily). Druhá oblast bádání — rentgenová spektroskopie — se velmi rozvinula nejdříve zásluhou prací V. L. MOSELEYHO v Anglii a pak ve Švédsku pracemi M. SIEGBAHNA a celé jeho školy.

K širokému využití Lauova objevu nejen pro vědecké účely, ale i pro široké pole v technické praxi dala pak v r. 1916 základ metoda, kterou navrhli nezávisle na sobě jednak P. DEBYE a H. SCHERRER v Anglii, jednak A. W. HULL v Americe. Tato metoda umožňovala studovat difrakční jevy na krystalických látkách ve formě prášků. Různé obměny této metody, jež pak byly v průběhu doby vypracovány, umožnily využít difrakce rentgenových paprsků pro rentgenovou strukturní analýzu látek kvalitativní i kvantitativní fázové analýzy slitin, měření makroskopických i mikroskopických pnutí materiálů, stanovení velikosti krystalků v submikroskopickém oboru, určování textur a řadu dalších problémů důležitých v technické praxi. Také rentgenová spektroskopie si ve svém pozdějším vývoji probojovala cestu z vědeckých ústavů do technické praxe. Zejména jeden její úsek, sekundární rentgenová analýza, nabývá čím dále tím většího uplatnění jako rychlá nedestruktivní metoda.

U nás se začaly rozvíjet práce z fyziky rentgenových paprsků, spektroskopie

a difraktografie poměrně pozdě, až po r. 1920. Bylo to jednak proto, že tyto práce vyžadovaly poměrně nákladná zařízení a dotace našich vysokých škol byly naproti tomu malé, jednak proto, že styky našich tehdejších předních fyziků se zahraničními fyzikálními pracovišti, kde se na této problematice pracovalo, byly málo rozvinuté. Z počátku vznikla u nás tři taková střediska, vesměs na Karlově universitě v Praze, a to u prof. V. POSEJPALA ve Fyzikálním ústavu, u prof. F. ULRICHÁ v Mineralogickém ústavu a doc. V. DOLEJŠKA, který měl tehdy laboratoř ve Fyzikálně chemickém ústavu u prof. J. HEYROVSKÉHO.

Tematika řešená u prof. V. Posejpala se týkala hlavně fyzikálních vlastností rentgenových paprsků, zejména fluorescence a absorbce. Prof. Posejpal sám napsal v r. 1925 knihu „Roentgenovy X-paprsky“, naši první česky psanou učebnici o rentgenových paprscích. Většina z jeho doktorandů, kteří podali doktorské disertační práce z oboru rentgenových paprsků, sice odešla učit na střední školy, čímž jejich práce na úseku rentgenových paprsků skončily, ale někteří později získali místo v průmyslových výzkumných ústavech a rozvíjeli pak aplikace difrakce rentgenových paprsků na řešení průmyslových problémů. Ve spojitosti s tím je třeba jmenovat zejména P. SKULARIHO, žáka prof. Posejpala, který působil ještě donedávna ve Výzkumném ústavu kovů v Panenských Břežanech a který na svém pracovišti aplikoval rentgenové difrakční metody zejména na měření pnutí a studium problému únavy v kovových materiálech.

Poněkud jiným směrem byly zaměřeny práce u prof. F. Ulricha. Prof. Ulrich byl mineralog a tak aplikoval rentgenovou difrakci na studium minerálů; pracoval metodou Lauovou i klasickou metodou práškovou Debyovou a Scherrerovou. Použil také Lauovy metody při rozhodování sporných případů, které se týkaly pravosti drahých kamenů, k nimž byl zván jako expert. Provedl dokonce pro Škodovy závody i studii strukturních změn ocele při vyšších teplotách ve Westgrenově-Phragménově vysokoteplotní komůrce. V práci však nemohl pokračovat, poněvadž tragicky zahynul za okupace; malá skupina mladých pracovníků soustředěná kolem něho se rozptýlila. Tyto práce, jež byly v té době u nás jedinými a přímo navazovaly na Lauův objev difrakce rentgenových paprsků na krystalech, byly tím v Mineralogickém ústavu na delší dobu přerušeny a teprve po květnu 1945 se znovu rozvinuly.

Nejvíce ze všech tří zmíněných středisek bádání v oblasti rentgenových paprsků přineslo poslední, jež se vytvořilo kolem mladého doc. V. Dolejška. Dolejšek se vrátil ze svého studijního pobytu v Lundu u Siegbahna a s obrovskou energií přes velké obtíže si s pomocí prof. J. Heyrovského zařídil poměrně dobře vybavenou laboratoř pro rentgenovou spektroskopii. V krátké době soustředil kolem sebe mladé nadšené pracovníky a dokázal vytvořit pro ně psychologicky dokonalé ovzduší pro vědecké bádání. Nemohu se tu rozepisovat o duchu a pracovním nadšení, které v jeho laboratoři vládlo, ani o velkém vlivu, který měl na nás, své mladé spolupracovníky, i o kouzlu jeho vlastní osobnosti, ač jedině tím lze vysvětlit úspěch, který později měli četní členové jeho pracovního kolektivu na úseku rentgenové spektroskopie i difrakce. Musím odkázat čtenáře v tom směru na články, které vyšly u příležitosti padesátého

výročí Fyzikálního ústavu Karlovy university v tomto časopise¹⁾) a jež charakterizují Dolejškův profil vědce i vysokoškolského učitele. Z počátku byly práce v této laboratoři zaměřeny výhradně na problematiku rentgenové spektroskopie: přesná měření vlnových délek emisních rentgenových čar, přesná měření mřížkových konstant krystalů pro spektroskopické účely a vliv chemické vazby na rentgenová absorpční spektra. Později, když Dolejšek — tehdy už profesor Karlovy university — navázal spojení s Akc. společností dř. Škodovými závody jako expert a když byl zřízen ve skromných prostorách jeho laboratoří Fyzikální výzkum tohoto podniku pod jeho vedením, přibyl nový směr prací: aplikace rentgenové difrakce na řešení průmyslových problémů, jež zajímaly Škodovy závody. A těchto problémů bylo nemálo. Tak došlo k aplikacím rentgenové difrakce na měření pnutí, fázovou analýzu slitin, určování textur, měření velikosti krystalů i k počátkům vývoje sekundární rentgenové analýzy pro průmyslové účely. O rozvoj těchto prací se zejména zasloužili tři z doktorandů prof. Dolejška: V. VAND, A. NĚMEJCOVÁ-KOCHANOVSKÁ a J. BAČKOVSKÝ. K nim přistupují později ještě dva nově přijatí zaměstnanci Fyzikálního výzkumu J. BROŽ a F. KHOL. Jedině toto spojení se Škodovými závody umožnilo, že vývoj prací z oboru rentgenové difrakce pod vedením prof. Dolejška nebyl přerušen v době okupace při uzavření našich vysokých škol a mohl nejen klidně pokračovat, nýbrž měl i dost finančních prostředků. A tak malá skupina těchto rentgenových pracovníků mohla připravit půdu pro vlastní rozvoj tohoto úseku fyziky, který nastal po skončení druhé světové války, zejména však po roce 1948.

Po skončení války počaly s rozvojem našeho průmyslu rychle pronikat do technické praxe a vyvíjet se zejména aplikace rentgenových difrakčních metod. Velmi mnoho k tomu přispěla i ta okolnost, že Chirana začala vyrábět rentgenové aparatury s vhodnými mikrostrukturními trubicemi, takže se podstatně usnadnilo opatřování vhodných zdrojů rentgenových paprsků pro strukturální účely. Až do té doby jsme byli odkázáni na dovoz ze zahraničí, především z Německa. Hlubší základní výzkum v oboru rentgenové difrakce (dynamická teorie difrakce, studium poruch krystalové mříže) a rentgenové spektroskopie se však rozvinul až po zřízení Čsl. akademie věd v jejích ústavech, především v Ústavu technické fyziky²⁾), který se postupem doby vyvinul ze zmíněného Fyzikálního výzkumu Škodových závodů. Tam se také zásluhou A. LÍNKA rozvinulo určování struktur krystalů opírající se o moderní výpočtovou techniku. O něco později vzniklo druhé středisko určování krystalových struktur, a to zejména anorganických látek, v Ústavu anorganické chemie SAV v Bratislavě vedené F. HANICEM, bývalým aspirantem Ústavu technické fyziky. Velmi slibně se vyvíjejí práce z oblasti rentgenové difrakce též v brněnské Laboratoři pro výzkum vlastností kovů ČSAV pod vedením M. ČERNOHORSKÉHO; práce se týkají hlavně aplikace rentgenové difrakce na problémy slitin, ale vedle toho i základního výzkumu, zejména použití nomogramů na určování parametrů krystalové mřížky látek.

V současné době je tedy stav takový, že základní výzkum z rentgenové difrakto-

1) Pokroky matematiky, fyziky a astronomie 2 (1957), str. 438 a 496.

2) Od ledna 1962 přejmenován na Ústav fyziky pevných látek.

grafie a spektroskopie je soustředěn hlavně na třech zmíněných pracovištích ČSAV v Praze, v Brně a v Bratislavě. Vedle toho, ovšem v menší míře, je zastoupen i na některých z našich vysokých škol, na nichž se také konají přednášky z tohoto oboru, a tím jsou získáváni další mladí pracovníci. Co však má podstatný význam, je úspěšné rozšíření a zavedení praktických aplikací Lauova objevu do resortních a podnikových laboratoří našeho průmyslu v širokém rozsahu. Podařilo se také zajistit vzájemný styk a výměnu zkušeností mezi pracovníky těchto laboratoří, často místně velmi vzdálených, s pracovníky ústavů Akademie na „Rozhovorech o aktuálních otázkách ve strukturní rentgenografii“, jež jsou pravidelně pořádány na půdě Akademie a sdružují více než 200 pracovníků tohoto oboru z celého území naší republiky.

Jen málo objevů ve fyzice zasáhlo u nás účinně v takové šíři do tolika průmyslových odvětví jako Lauův objev difrakce rentgenových paprsků na krystalové mřížce.

JADERNÁ MAGNETICKÁ REZONANCE

EUGEN ŠIMÁNEK, Praha

ÚVOD

Objev jaderné magnetické rezonance je názorným příkladem toho, jak účinně zasáhly moderní radiotechnické metody do rozvoje současné experimentální fyziky. Prvé pokusy o nalezení rezonanční absorpce jaderných momentů v pevných látkách na rádiových vlnách prováděl již v roce 1936 holandský fyzik GORTER, avšak bez úspěchu. Až teprve v roce 1945, kdy již byly k dispozici citlivější metody, podařilo se provést první úspěšné pokusy s jadernou rezonancí americkým fyzikům BLOCHOVI a PURCELLOVI. Od té doby nachází metoda jaderné magnetické rezonance stále nová použití nejen ve fyzice, ale také v chemii, biologii, lékařství a technice. Tento článek si klade za úkol osvětlit základní zákonitosti, jimiž se řídí tento jev. Je volen pokud možno elementární postup výkladu. Chceme dosáhnout toho, aby čtenář mohl pochopit také základní myšlenky moderních původních prací v tomto oboru. O jaderné magnetické rezonanci existuje již mnoho rozsáhlých monografií. Jednou z nejprístupněji napsaných je kniha od E. R. ANDREWA [1], která byla též přeložena do ruštiny. Jaderná magnetická (někdy nazývaná také paramagnetická) rezonance má mnoho rysů společných s elektronovou paramagnetickou rezonancí. Hlavní rozdíl záleží v tom, že namísto elektronových magnetických momentů zúčastňují se v jaderné magnetické rezonanci magnetické momenty atomových jader zkoumané látky. Paramagnetická elektronová rezonance byla v tomto časopisu rozebírána z hlediska generace (tzv. maserů) K. ŽDÁNSKÝM [2]. Doporučujeme čtenáři, aby si přečetl v této práci zejména kapitoly Paramagnetická rezonance a Dvouhladinový