

# Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

---

Ivo Kraus

Nobelova cena za chemii v roce 1985 udělena fyzikovi a matematikovi

*Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*, Vol. 32 (1987), No. 1, 35--37

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/139878>

## Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1987

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>

**NOBELOVA CENA ZA CHEMII  
V ROCE 1985 UDĚLENA  
FYZIKOVI A MATEMATIKOVI**

Zlatá medaile, která je součástí ceny udělované v den úmrtí Alfréda Nobela předním osobnostem světové vědy a kultury, nese latinský citát z Vergilia: „Inventas vitam juvet excoluisse per artes“ (Jaká slast je vidět lidský život zušlechtěný vynálezy).

Když koncem roku 1985 převzali Nobelovu cenu za chemii Jerome Karle a Herbert Hauptman, dostalo se tím vlastně další vysoké pocty i rentgenovým paprskům, záření, které známe stejně dlouho jako neobyčejný Nobelův testament – od listopadu 1895.

Přání Alfréda Nobela, aby se roční úroky z jeho majetku rozdělovaly jako ceny osobám, jejichž činnost v předcházejícím období přinesla lidstvu největší užitek, bylo poprvé splněno 10. prosince 1901. Cenu za fyziku udělila tehdy Švédská akademie věd Wilhelmu Conradu Röntgenovi. Jen málo objevů v přírodních vědách poskytlo příležitost pro experimentální i teoretickou práci tolika fyzikům jako právě rentgenové záření. A zcela bez konkurence jiných oblastí lidského poznání je počet těch, kterým byla za výzkum a praktické využití rentgenových paprsků udělena Nobelova cena. Jsou to:

1901 – *Wilhelm Conrad Röntgen*,

1914 – *Max Theodor Felix von Laue* (za objev difrakce rtg paprsků na krystalech),

1915 – *William Henry Bragg, William Lawrence Bragg* (za výzkum struktury krystalů pomocí rentgenových paprsků),

1917 – *Charles Glover Barkla* (za objev charakteristického rentgenového spektra prvků),

1924 – *Karl Manne Georg Siegbahn* (za objevy a významné výzkumy v oblasti rentgenové spektroskopie),

1927 – *Arthur Holly Compton* (za objev změny vlnové délky při rozptylu rtg paprsků),

1936 – *Peter Joseph William Debye* (za objev metody výzkumu struktury polykrystalických látek rentgenovými paprsky a prohloubení poznatků o stavbě pevných látek),

1954 – *Linus Carl Pauling* (za výzkum povahy chemických vazeb a jejich využití k popisu struktury složitých sloučenin),

1962 – *John Cowdery Kendrew, Max Ferdinand Perutz* (za výzkum struktury globulárních bílkovin),

1963 – *Maurice Hugh Frederick Wilkins, Francis Harry Compton Crick, James Dewey Watson* (za určení molekulární struktury nukleových kyselin pomocí rentgenových paprsků),

1964 – *Dorothy Crowfootová-Hodkinsonová* (za určení molekulární struktury penicilínu, cholesterolu a vitamínu B<sub>12</sub> pomocí rentgenových paprsků),

1976 – *William Nunn Lipscomb* (za studie struktur boranů),

1985 – *Jerome Karle, Herbert Hauptman* (za vypracování přímých metod určování krystalových struktur).

Více než osmdesátiletá historie Nobelovy ceny svědčí o kontinuitě významu Röntgenova objevu. Rozhodnutí udělit v roce 1985 cenu za přímé metody řešení struktur Jerome Karlemu a Herbertu Hauptmanovi je dokladem toho, že di-

frakce rentgenového záření si uchovává pevné místo i v současné etapě vědeckotechnického pokroku.

Oba významní Američané jsou v krystalografickém světě dobře známé osobnosti už od začátku padesátých let. Jerome Karle, narozený 18. 6. 1918 v Brooklynu, vede od roku 1944 laboratoř pro výzkum struktury hmoty v Naval Research Laboratories Washington. (Není bez zajímavosti, že v těžce laboratoři dosahuje při studiu krystalových struktur vynikajících výsledků i jeho manželka Isabela L. Karle.) V roce 1952 byl jmenován profesorem matematiky a fyziky na univerzitě v Marylandu, v letech 1981–84 působil jako prezident Mezinárodní krystalografické unie.

Zatímco J. Karle byl při společné práci fyzikem, je úloha matematického mozku dvojice přisuzována Herbertu Hauptmanovi (nar. 14. 2. 1917 v New Yorku). Ten pracoval až do roku 1971 rovněž v Naval Research Laboratories, zároveň však vedl laboratoř matematické biologie na univerzitě v Marylandu. Posledních patnáct let je ředitelem výzkumu Lékařské nadace v Buffalu (Medical Foundation of Buffalo).

Jakou mají oba laureáti zásluhu na neobyčejně prudkém vzrůstu počtu organických a organometalických struktur určených během posledních tří desetiletí? V roce 1940 byly známy pouze 4 struktury, za dalších 10 let jen o 15 více. Po roce 1953, kdy Karle s Hauptmanem vydali monografii *Solution of the Phase Problem. I. The Centrosymmetrical Structures*, se počet vyřešených struktur začíná rychle zvyšovat; v roce 1960 jich bylo už 110, o deset let později 972 a na konci sedmdesátých let téměř čtyři tisíce.

Metodikou určování struktur rozumíme způsob stanovení polohy všech atomů obsažených v elementární buňce. Tento

úkol lze řešit např. tak, že na základě krystalochemických údajů a informací o souměrnosti vytvoříme určitý model krystalu, tj. zvolíme pravděpodobné hodnoty souřadnic atomů. Jestliže byl model správný, pak se experimentálně pozorovaný difrakční obraz od vypočteného neliší. Nesouhlas vyžaduje návrh nové varianty rozložení atomů.

Hlavním nedostatkem této metody, užívané brzy po Laueho objevu (1912) k řešení jednoduchých struktur, je závislost úspěchu dosažených výsledků na správnosti navrženého modelu. Proto bylo úsilí krystalografů vedeno vždy snahou vyvinout postup ke stanovení polohy atomů přímo z naměřených intenzit  $I_{hkl}$  záření rozptýleného krystalem (reflektovaného jeho atomovými mřížkovými rovinami  $hkl$ ).\*)

Rozdělení rozptylující hmoty v krystalové mřížce, tj. hustotu elektronového náboje  $\rho(xyz)$ , lze vyjádřit trojitou Fourierovou řadou, jejímiž koeficienty jsou strukturální amplitudy  $F_{hkl}$ . Jestliže  $F_{hkl}$  známe, dá se naopak sestrojít funkce  $\rho(xyz)$  a nalézt tak řešení dané úlohy, neboť lokální maxima  $\rho(xyz)$  odpovídají polohám atomů. Experimentálně můžeme získat hodnoty  $I_{hkl} \sim F_{hkl}^2$ , resp.  $|F_{hkl}|$ , nikoliv však znaménko  $F_{hkl}$ . Problém stanovení struktury se tak mění na úkol určení znaménka strukturální amplitudy.

Tuto obtíž odstraňuje do jisté míry Pattersonova syntéza; v Pattersonově funkci, dané Fourierovou řadou, nevystupují jako koeficienty strukturální amplitudy, ale jejich druhé mocniny. Metoda však

\*) Intenzita  $I_{hkl}$  vlny je úměrná čtverci tzv. strukturální amplitudy  $F_{hkl}$  definované jako poměr amplitudy vlny rozptýlené atomy elementární buňky k amplitudě vlny rozptýlené za stejných podmínek jedním elektronem. Veličina  $F_{hkl}$  závisí na poloze atomů v elementární buňce.

nevede přímo k rozdělení atomů, udává pouze směry a velikosti vektorů spojujících maxima elektronové hustoty. Její aplikace v případě komplikovaných struktur je velmi obtížná.

Řešení obecné úlohy umožnil teprve postup, v němž Karle s Hauptmanem použili statistické metody. Pomocí náročného matematického aparátu (souřadnice atomů s neznámou polohou měly význam náhodně proměnných veličin) se podařilo problém stanovení struktury formulovat jako řešení přeurčené soustavy lineárních rovnic, z nichž každá byla zatížena velkou statistickou chybou závislou na strukturálních amplitudách a složitosti struktury. Monografie, v níž Karle s Hauptmanem ukázali, jak mohou statistické metody radikálně urychlit mapování struktury molekul, vyšla v roce 1953. Řadu let však zůstala opomíjena, protože podle mínění mnoha odborníků obsahovala návod, „jak lze dělat věci, o kterých se ví, že jsou nemožné“.

Skutečnost, že cenu nezískali společně dva chemici, ale matematik H. Hauptman a fyzik-krystalograf J. Karle, dokumentuje význam mezioborové – týmové spolupráce. Podobně jako v mnoha jiných případech i zde předcházela myšlenka s velkým náskokem praktickou aplikaci. Nedůvěra v realizaci metody byla překonána teprve po vývoji výpočetních systémů umožňujících využití přímých metod bez detailní znalosti jejich teorie.

V průběhu sedmdesátých let se stal Karleho a Hauptmanův přístup běžnou krystalografickou technikou. Úplná struktura může být dnes pomocí plně automatizovaných systémů určena i nespécialisty za několik dnů. Až dosud se metoda užívala pro malé molekuly asi o stovce atomů. Jejím rozšířením na analýzu mnohem větších molekul, např. proteinů, lze očekávat

kvalitativní změny našeho poznání především v oblasti molekulární biologie.

*Ivo Kraus*

## NOBELOVA CENA ZA FYZIKU V ROCE 1985

Po přestávce trvajících dvaadvacet let byla Nobelova cena za fyziku udělena opět německému vědci. Jejím nositelem se stal západoněmecký experimentální fyzik Klaus von Klitzing za objev kvantového Hallova jevu v polovodičových součástkách s dvojrozměrným systémem nositelů náboje, ochlazených na teplotu kapalného hélia a vystavených působení silných magnetických polí.

Současný trend v rozvoji elektroniky vede ke konstrukci součástek s velkou pohyblivostí nositelů náboje schopných zpracovávat vysoké frekvence. K tomuto cíli jsou vytvářeny součástky, ve kterých jsou nositele náboje zprostředkující vedení proudu – elektrony nebo díry – soustředěny do velmi tenké vrstvy. Pokud je tloušťka vrstvy srovnatelná s meziatomovou vzdáleností, představuje vrstva z hlediska nositele kvantovou potenciálovou jámu a jeho pohyb je omezen na dva směry. Dvojrozměrné systémy lze vytvářet v tranzistorech řízených polem nebo v polovodičových heterostrukturách. Jejich výhodou je, že nositele náboje jsou prostorově odděleny od donorů a akceptorů; vliv rozptylu na těchto nečistotách je potlačen a výsledná pohyblivost je velká. Kromě toho vykazují součástky s dvojrozměrnými systémy jinou teplotní závislost vodivosti než polovodiče s prostorovým rozdělením nositelů. Zatímco u normálních polovodičů vodivost se snižující se teplotou klesá a při teplotě kapalného