

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Stanislav Daniš

Cesta sněžové vločky k Nobelovým cenám a k Mezinárodnímu roku
krystalografie

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 59 (2014), No. 3, 177--186

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/144022>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 2014

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>

Cesta sněhové vločky k Nobelovým cenám a k Mezinárodnímu roku krystalografie

Stanislav Daniš, Praha

Ubi materia, ibi geometria.
Johannes Kepler

Rok 2014 byl Organizací spojených národů vyhlášen Mezinárodním rokem krystalografie. Stalo se tak u příležitosti několika významných výročí základních objevů oboru, jehož vědecké počátky spadají do počátku 17. století a váží se k našemu hlavnímu městu.

1. Antické hledání krásy

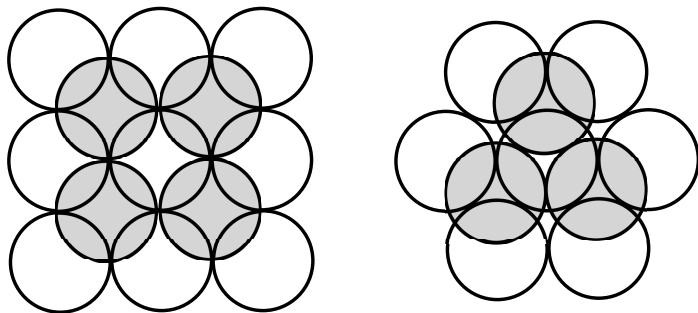
Zřejmě každá přírodní věda má svůj počátek u řeckých filozofů. Samo slovo krystal pochází z řeckého slova *κρυσταλλος* označujícího led, tuhé skupenství vody. Poprvé se v tomto významu objevuje v Homérových eposech *Ílias* (... *nebo jak mrazný sníh, neb led, jenž utuhl z vody*, XXII, 152) a *Odysseia* (... *ano i led kol našich štítů srážel*, XIV, 477). Řeckým učencům, hledajícím v přírodě krásu a harmonii, neunikla souměrnost krystalů různých přírodních minerálů – křemene, apatitu, pyritu, ... Dokonce i Platon byl prý inspirován pravidelnými geometrickými tvary krystalů.

2. Pražská procházka Johanna Keplera

Počátkem sedmnáctého století byl pražský dvůr císaře Rudolfa II. jedním z center novověké přírodovědy. Novou observatoř zde hodlal budovat Tycho Brahe.¹ Na jeho doporučení byl Rudolfem II. do Prahy pozván matematik a astronom Johannes Kepler, který zde později formuloval první dva ze svých zákonů o pohybu nebeských těles. Kepler ovšem nepřispěl významným dílem jen k rozvoji astronomie a matematiky. Stojí též u kolébky krystalografie, o níž pojednáme dále.

Jak k tomu došlo? Na počátku byla Keplerova snaha překvapit přítele a mecenáše Jana Matouše Wackera z Wackenfelsu nevšedním novoročním darem. Úkol to nebyl snadný. Matouš Wacker byl vzdělaný muž a podobně jako další jeho urození současníci si liboval v kuriozitách. Tou dobou jej zajímalo – nic. A jak dát nic? Tato otázka Keplera tížila a nevěděl co si s ní počít. Během jedné z cest Prahou si všiml sněhové vločky, která mu ulpěla na kabátě. Byla překrásná – z jejího středu vycházelo šest symetrických paprsků a z každého paprsku vycházely paprsky další. Pro Keplera,

¹Tycho observatoř nakonec nevybudoval v Praze, ale na zámku v Benátkách nad Jizerou.



Obr. 1. Dva typy nejtěsnějšího uspořádání koulí v prostoru diskutované Keplerem v jeho pojednání „Novoroční dárek aneb o šesterečném sněhu“. Vlevo je uspořádání pravoúhlé, vpravo šesterečné, hexagonální. Spodní vrstva koulí je znázorněna bíle, horní šedě.

který měl cit pro krásu a geometrii, to musel být pěkný pohled. Vločka za chvíli roztála a změnila se – v nic. „To je ten pravý dar!“ možná zajásal. Své úvahy sepsal do útlého spisku *Novoroční dárek aneb o šestiúhelníkovém sněhu*². V tomto díle se mimo jiné věnuje otázce, jakým způsobem uspořádat kuličky, aby zaplnily prostor co nejplněji, tedy tak, aby zbylo co nejméně prázdného prostoru. Ryze geometrickými úvahami objevil dvě varianty³, které dnes nazýváme nejtěsnějším uspořádáním koulí, viz obrázek 1. Byť jeho analýza nezachází do podrobností, vždyť nepsal vědecké pojednání ale novoroční dar, stály Keplerovy úvahy u zrodu krystalografie. Johannes Kepler se jako první přírodovědec zabýval uspořádáním hmoty, krystalické vody, na úrovni základních částecek hmoty. Trvalo však ještě několik století, než byla Keplerova představa o pravidelném uspořádání částic ověřena.

3. Počátky krystalografie – měření tvaru krystalu

Keplerovi následovníci, můžeme-li je tak nazvat, se zabývali zejména studiem geometrických tvarů krystalů. Mineralogům nedávala spát jejich nápadná podobnost. Například krystaly křemene mají bez ohledu na místo nálezů stejný tvar. Dánský přírodovědec Nicolaus Stena pečlivým proměřením úhlu došel k závěru, že pro daný krystal jsou úhly mezi stěnami neměnné.

Podobnými měřeními se zabýval francouzský mineralog René Just Haüy. Traduje se, že při jednom měření mu spadl velký krystal na zem a rozbil se na malé kousky. Haüy si všiml, že malé kousky krystalu mají stejný tvar jako původní krystal. Haüy došel k logickému závěru, že krystal obsahuje jakési jádro, základní motiv, který je určen přírodou a jehož opakováním se vytvoří velké krystaly. Dnes tomuto základnímu motivu říkáme základní (elementární) buňka.

Budeme-li chtít, podobně jako Kepler, zaplnit základním motivem prostor beze zbytku, nemůže být tvar základního motivu – buňky – libovolný. V současnosti jich rozeznáváme sedm, nazýváme je krystalografické třídy nebo soustavy a jejich tvary jsou popsány v tabulce 1.

²Latinský název *Strena seu De Nive sexangula*.

³Pozn. ved. red.: Obě varianty jsou shodné, protože první lze převést na druhou pomocí vhodné rotace trojrozměrného prostoru.

soustava	hrany	úhly
krychlová (kubická)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonální	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
ortorombická	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
hexagonální (šesterečná)	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
romboedrická (trigonální)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
monoklinická (jednoklonná)	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
triklinická (trojklonná)	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

Tab. 1. Krystalografické soustavy

Je však ještě potřeba tyto buňky zaplnit atomy, krystalograf by řekl hmotnou bází. Tvary základních buněk se řídí pravidly symetrie a jim podléhá i umístění atomu. Umístíme-li atom například na jeden z vrcholů krychle, princip symetrie vyžaduje, aby i zbývající rohy byly obsazeny atomy. Podobně dáme-li atom do středu jedné ze stěn, podle zákona symetrie bude nutné umístit atom do středu ostatních stěn. Toto pravidlo je třeba zohlednit například při řešení struktury, abychom dodrželi stechiometrii dané látky.

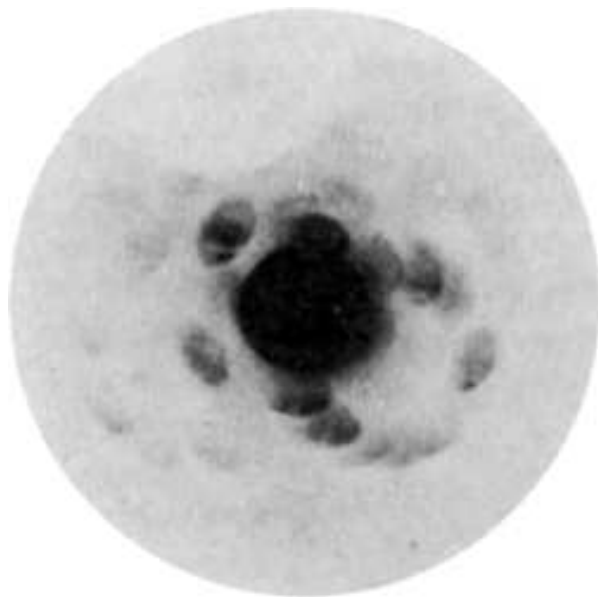
Množství kombinací, jak lze umístit atomy v základní buňce, je konečné. Zcela nezávisle na sobě odvodili v roce 1891 jejich počet německý matematik Arthur Moritz Schoenflies a ruský matematik Jevgraf Stěpanovič Fjodorov – je jich celkem 230. Odborně je nazýváme prostorové grupy. Jsou podrobně popsány v mezinárodních krystalografických tabulkách [3] a každá prostorová grupa určuje jednoznačně možné polohy atomů uvnitř základní buňky s danou symetrií.

4. Průhled do světa atomů

Na konci 19. století nebyly v mineralogických kruzích představy o pravidelném uspořádání atomů v krystalických látkách přijímány jednoznačně. Chyběl experiment, který by tuto hypotézu potvrdil nebo vyvrátil. Mikroskop byl sice znám již od roku 1590, nepostačoval však k zodpovězení otázky „Jak jsou uspořádány atomy v krystalech?“, neboť k tomu potřebujeme nahlédnout dovnitř hmoty, látky.

Jako první nahlédla roku 1912 do světa atomů trojice německých fyziků Max Laue, Paul Knipping a Walter Friedrich na Univerzitě v Mnichově. Max Laue na základě rozhovoru s Pietrem Paulem Ewaldem dospěl k názoru, že pokud jsou krystaly tvořeny pravidelným uspořádáním atomů a paprsky X jsou vlnové povahy, musí být po ozáření krystalu paprsky X pozorovány ohybové (difrakční) obrazce.⁴ Spolu s Paulem Knippingem (asistent W. C. Röntgena, který v Mnichově působil jako ředitel Fyzikálního ústavu) a Walterem Friedrichem (asistent A. Sommerfelda, dříve studoval u W. C. Röntgena) uskutečnili experiment, který vešel do historie fyziky. Svou podstatou byl velmi jednoduchý a nijak se nelišil od pokusu s optickými difrakčními mřížkami prováděnými už na základních či středních školách. „Jen“ místo světelného paprsku byl použit zdroj paprsků X (Crookesova trubice), difrakční mřížku zastoupil krystal skalice modré ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) a jako detektor posloužila fotografická deska. Max Laue si byl vědom toho, že difraktované paprsky budou velmi slabé, expozice

⁴O historii objevu paprsků X viz Ivo Kraus: *Ze životopisu paprsků X*, PMFA 41 (1996), 296–302.



Obr. 2. První difrakční obrázek pořízený paprsky X dne 23. 4. 1912 M. Lauem, P. Knippingem a W. Friedrichem

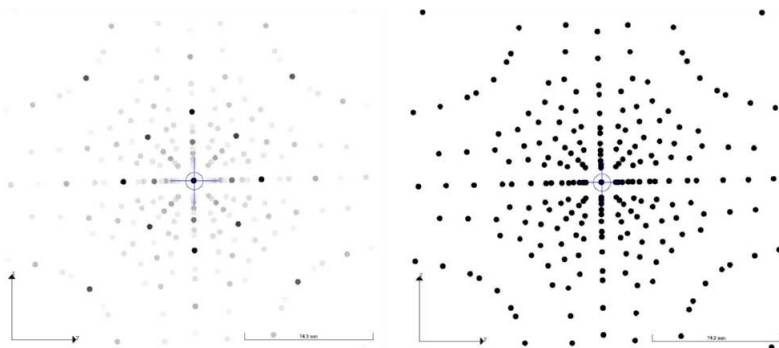
proto trvala několik hodin. První experiment nevyšel, ale trojice vědců se nevzdala. Knipping s Friedrichem, kteří měli bohaté zkušenosti s paprsky X, zdokonalili stínění. Současně Knipping umístil další fotografickou desku (druhý detektor) *před* krystal. Co kdyby paprsky difraktované zpětně (dnes tomu říkáme difrakce na zpětný odraz) byly snáze detekovatelné než paprsky difraktované ve směru dopadajícího záření a ovlivněné absorpcí? Po několikahodinové expozici obdrželi snímek, který je zachycen na obrázku 2.

Stíny kolem středového ztemnění snímku způsobené průchodem dopadajícího (primárního) paprsku jsou odpovědí na dvě otázky, které si vědci kladli. Jsou nejen důkazem vlnové povahy paprsku X, ale také pravidelného uspořádání atomů v krystalech. Pro další experimenty použili Laue, Knipping a Friedrich krystal sirníku zinečnatého ZnS, který vytváří krystaly ve tvaru krychle. Pokud záření dopadalo kolmo na stěnu krychle, měl difrakční obrazec stejnou, tj. čtyřčetnou symetrii. Zbývalo už jen vysvětlit, proč a jak takový obraz vzniká.

Při hledání odpovědi na tuto otázku zúročil Max Laue svá berlínská studia u Maxe Plancka, během nichž se mimo jiné věnoval rozptylu světla na optických mřížkách. A pokud jsou atomy pravidelně uspořádány v prostoru, tak tvoří podobnou mřížku, jen o jednu dimenzi vyšší, třírozměrnou.

Max Laue odvodil soustavu rovnic popisující podmínku vzniku ohybových jevů na třírozměrné mřížce, kde její základní perioda, základní buňka, je také trojrozměrná. Její tvar a velikost jsou definovány třemi vektory \vec{a} , \vec{b} a \vec{c} ,

$$\begin{aligned}\vec{a} \cdot \vec{q} &= 2\pi h, \\ \vec{b} \cdot \vec{q} &= 2\pi k, \\ \vec{c} \cdot \vec{q} &= 2\pi l,\end{aligned}\tag{1}$$



Obr. 3. Simulované lauegramy pro kubický krystal ZnS, záření dopadá kolmo na stěnu krychlového krystalu. Vlevo je záznam s rozlišením intenzit difraktovaných paprsků – takto by vypadal negativ fotografické desky použité M. Lauem. Vpravo je výsledek Laueova modelu. Intenzity všech paprsků jsou stejné.

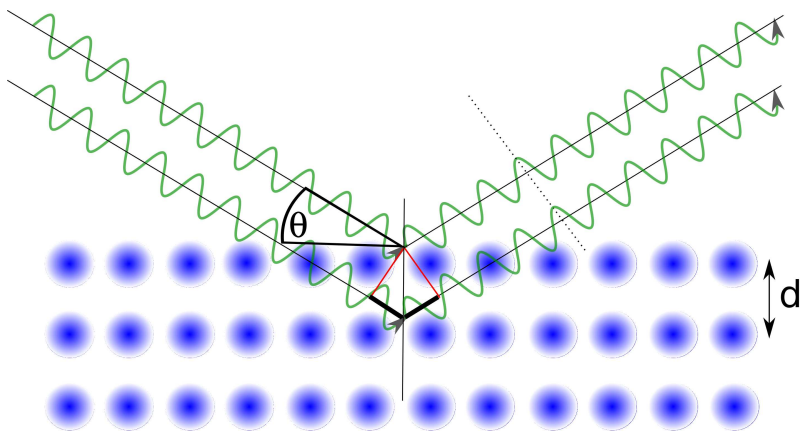
kde h, k, l jsou celá čísla, $\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ je difrakční vektor, který je definován jako rozdíl vlnového vektoru difraktovaného (\vec{k}_f) a dopadajícího (\vec{k}_i) záření. Soustava rovnic (1) se dnes na počest svého objevitele nazývá Laueovy difrakční podmínky. Výsledky experimentu a vysvětlení vzniku difrakčního obrazce publikovali Laue a jeho spolupracovníci ve dvou článcích o rok později [2]. Jejich práce se setkala s velkým ohlasem. Dokonce i A. Einstein, který v roce 1912 působil v Praze⁵, zaslal Laueovi blahopřejný telegram. Laueova průkopnická práce byla již následujícího roku oceněna udělením Nobelovy ceny v oboru fyzika za difrakci paprsků X na krystalech. Se svými asistenty, kteří nominováni nebyli, se spravedlivě rozdělil o finanční odměnu s cenou spojenou. Nejpalcivější problémy byly objasněny, mnohé však zůstávalo tajemstvím.

5. Odhalování struktury látek

V Anglii se o výsledcích Laueova experimentu dozvěděl z dopisu Larse Vegarda William Henry Bragg, jenž byl uznávaným odborníkem na paprsky X a do doby Laueova pokusu byl zastáncem jejich částicové povahy. Výsledek experimentu byl však natolik průkazný, že Bragg uznal vlnovou povahu paprsků X. V následujících letech vytvořil spolu se svým synem Williamem Lawrenceem nesmírně výkonný vědecký tým.

Laue sice dokázal vysvětlit vznik difrakčního obrazu, ale nebyl schopen objasnit příčinu rozdílné intenzity difrakčních stop na fotografické desce, viz obr. 3. Prokázal sice, že atomy jsou v krystalu pravidelně uspořádány, ale zůstalo mu skryto *jak*. Laueovy rovnice (1) totiž dokáží jen předpovědět, kde se bude daná stopa nacházet (známe-li periodu mřížky), avšak nedokáží určit její intenzitu. To zaujalo otce a syna Braggovy. Zkonstruovali vlastní difraktometr (nazvali jej spektrometrem), který je s malou modifikací používán dodnes. Místo fotografické desky použili ionizační komůrku. Mohli tak měřit intenzitu difraktovaných paprsků mnohem snáze než zčernáním emulze na fotografické desce.

⁵Albert Einstein pracoval v budově Německé univerzity v Praze ve Viničné ulici, kde dnes sídlí Přírodovědecká fakulta UK.



Obr. 4. K odvození Braggovy rovnice

Braggovi mladšímu se také podařilo odvodit jiný vztah pro vznik difrakčního obrazce. Prý jej k němu inspirovala slída, která se snadno odlupuje v tenkých vrstvách. Lawrence Bragg předpokládal, že tyto vrstvy – roviny – jsou utvořeny pravidelným uspořádáním atomů, jak je nakresleno na obr. 4. Nechme nyní na tyto roviny vzdálené od sebe na vzdálenost d dopadat pod úhlem θ záření o vlnové délce λ . Pod stejným úhlem budeme také sledovat intenzitu rozptýleného záření. Rentgenové záření je velmi pronikavé a větší část projde do vzorku, jen malá část se odrazí pod stejným úhlem θ směrem k detektoru. Představme si nyní dva paprsky a věnujme pozornost jen odrazu od rovin atomů. Horní paprsek se odrazí od první roviny. Dolní projde až ke druhé rovině a na ní dojde k odrazu, viz obr. 4. Dolní paprsek urazí oproti hornímu delší dráhu. Ta je určena úhlem dopadu θ a vzdáleností rovin d . Z pravoúhlého trojúhelníku snadno určíme, že vzdálenost, kterou urazí navíc oproti hornímu, je dvojnásobek délky odvěsny $d \sin \theta$. Abychom však na detektoru zaregistrovali nenulový signál, musí se vlny horního a dolního paprsku vhodně sečíst. Protože skládáme vlnění, mluvíme o interferenci. Součet dvou vln, sinusovek, je největší, když nejsou vůči sobě posunuty (tj. maxima a minima sinusovek jsou na stejném místě pro dolní i horní vlnu) nebo jsou posunuty o celistvý násobek periody, vlnové délky. Podmínka detekce signálu je tak pro přirozená čísla n matematicky popsána rovnicí

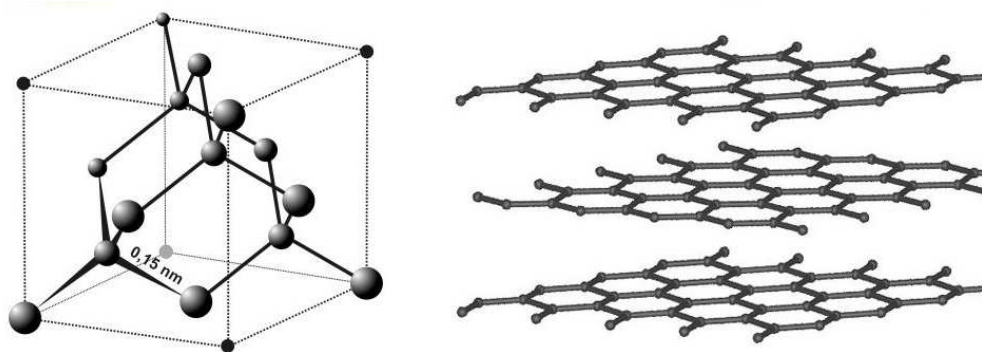
$$n\lambda = 2d \sin \theta. \quad (2)$$

Lze ukázat, že Laueovy rovnice (1) a Braggova rovnice (2) jsou ekvivalentní a jen jiným způsobem vyjadřují podmínku konstruktivní interference.

Pomocí Laueových rovnic nebo Braggovy rovnice lze určit, na jakých difrakčních úhlech můžeme pozorovat difraktované paprsky. Jak je to však s jejich intenzitami? Ani v jedné rovnici nevystupují atomy a jejich polohy.

Právě polohy atomu v základní buňce určují intenzitu pozorovaných difraktovaných paprsků. Amplituda rozptýleného záření je určena tzv. strukturálním faktorem, který je definován vztahem

$$F(q) = \sum_{n=1}^N f_n(q) e^{2\pi i \vec{q} \cdot \vec{r}_n}, \quad (3)$$



Obr. 5. Uspřádání atomů v diamantu (vlevo) a v grafitu (vpravo). Zdroj: en.wikipedia.org

kde \vec{q} je rozptylový vektor, který je dán rozdílem vlnového vektoru rozptýleného a dopadajícího záření $\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ (index f značí konečný – final – stav po rozptylu, i označuje počáteční – initial – stav, tj. před dopadem záření na vzorek), $q = |\vec{q}|$, $f_n(q)$ je atomový rozptylový faktor a \vec{r}_n je polohový vektor n -tého atomu v elementární buňce, ve které je celkem N atomů. Atomový rozptylový faktor f_n si můžeme v prvním přiblížení představit jako počet elektronů v obalu daného prvku (nebo iontu). Vztah (3) tedy udává, že strukturní faktor je Fourierovým obrazem rozložení elektronů v dané látce. Pokud bychom uměli naměřit přímo hodnoty strukturních faktorů, dokázali bychom odhalit strukturu, tj. zjistit polohy atomů v základní buňce, pouhou aplikací inverzní Fourierovy transformace. Bohužel však neměříme amplitudy rozptýleného záření, ale intenzitu, která je úměrná druhé mocnině velikosti $F(q)$,

$$I(q) \approx |F(q)|^2. \quad (4)$$

To znamená, že nejsme schopni plně zrekonstruovat rozložení elektronové hustoty z difrakčního záznamu jednoduchým způsobem. Polohy atomů v základní buňce tak musíme určovat nepřímou.

6. Struktura a vlastnosti látek

Když se podařilo rozluštit jednoduché krystalové struktury, ukázala se souvislost mezi vlastnostmi a strukturou, resp. atomárním uspořádáním v látce. Asi nejlépe to lze demonstrovat na dvojici forem uhlíku – diamantu a grafitu neboli tuhy. Jejich struktury jsou zobrazeny na obrázku 5. Základní buňka diamantu má tvar krychle a atomy uhlíku jsou umístěny ve specifických polohách tak, že vzdálenost mezi atomy je přibližně 0,15 nm. Z obrázku 5 je patrné, že atomy uhlíku jsou uspořádány do tetraedru. Takovéto uspořádání atomů uhlíku je zodpovědné za vlastnosti diamantu – je to nejtvrďší nerost, opticky je průhledný a je to téměř ideální izolant. Pokud tyto atomy umístíme do rovin složených z šestiúhelníků a tyto roviny dáme nad sebe, dostaneme strukturu grafitu, druhého nejměkčího nerostu. Opticky je neprůhledný a oproti diamantu také vede elektrický proud.

Dnes se cílenými změnami struktury upravují vlastnosti materiálů na míru dle jejich použití. Například dodáním elastického napětí do tenké povrchové vrstvy změním

v této vrstvě mřížový parametr kolmý k povrchu (materiál jakoby stlačíme). Takováto změna struktury se může projevit ve zvětšené odolnosti vůči mechanickému namáhání.⁶

7. Větší a větší struktury

Když se podařilo rozluštit první jednoduché struktury anorganických sloučenin, vědcům připadalo, že objasnění struktury téměř jakékoliv látky je na dosah ruky. Ukázalo se, že to není tak snadné. První struktury se podařilo odkrýt spíše šťastnou náhodou nebo intuicí. Pro složitější případy však scházela vědecká metoda, která by stanovila, jak v takových případech postupovat.

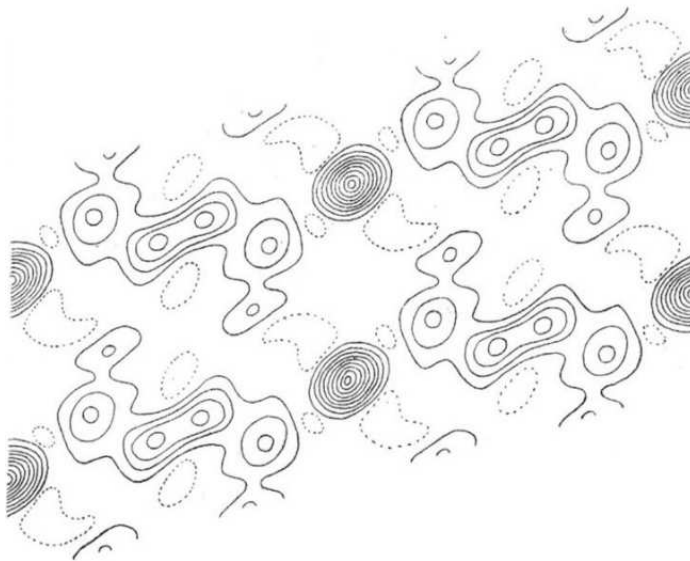
William Henry Bragg, který stál u samého počátku rentgenové strukturní analýzy, si tento nedostatek uvědomoval. Díky experimentu Maxe Laueho, výzkumů vlastních a mnohých jiných fyziků bylo prokázáno, že paprsky X jsou další, vysokoenergetickou složkou elektromagnetického spektra. Elektromagnetické záření se při interakci s látkou rozptyluje na elektronových obalech atomů a to, co nám difrakční obraz udává, je rozložení elektronů v látce. Jak již bylo uvedeno výše, je intenzita difraktovaného záření svázána s Fourierovým obrazem elektronové hustoty. A právě W. H. Bragg si uvědomil, že metoda, která by umožnila objasnit jakoukoliv strukturu, musí být založena právě na Fourierově transformaci. Ačkoliv určit z difrakčního záznamu elektronovou hustotu není snadné, podařilo se postupně odhalit struktury stále složitějších látek. Jedna z prvních sloučenin, u které byla metoda používající Fourierovu transformaci aplikována, byl minerál diopsid, $\text{CaMg}(\text{SiO}_3)_2$. Obrázek 6 ukazuje rozložení elektronové hustoty převzaté z publikace [1]. Vidíme, že maxima elektronové hustoty (na obrázku viditelná jako zhuštění „izočar“) odpovídají polohám jednotlivých atomů.

8. Krystalografie dnes

V současnosti krystalografie studuje nejen struktury nově nalezených minerálů, ale také velmi složitých organických molekul. Již v roce 1945 se podařilo rozluštit strukturu penicilinu (Dorothy Hodgkinová, Nobelova cena za chemii 1964), později i mnohem složitějších látek jako hemoglobin (Max Perutz, Nobelova cena za chemii 1962) nebo DNA (Wilkins, Watson a Crick, Nobelova cena za fyziologii nebo medicínu 1962). Nedávno se vědcům podařilo odhalit stavbu buněčné organely ribozómu [4]. V tomto případě bylo třeba nalézt přesné umístění více než 100 000 atomů! Dnes se zcela běžně studují struktury virových částic, znalosti jejich struktury mohou chemikové a biologové využít pro hledání nových léků.

V oblasti fyziky a materiálového výzkumu se krystalografie ponořila do nanosvěta. Pomocí silných zdrojů rentgenových paprsků (tzv. zdroje synchrotronového záření) dokážeme dnes studovat struktury objektů, jejichž rozměry jsou v řádu miliardtin metrů – např. nanočástičky, kvantové tečky a dráty, nanotrubičky a podobně. Praktické uplatnění toto studium nachází zejména při ladění vlastností materiálu na míru, jeho zamýšleného použití a při hledání nových materiálů.

⁶Metodou tzv. balotínování, kdy se materiál ostřeluje proudem skleněných kuliček, se upravují mechanické vlastnosti různých mechanických součástí automobilu, které jsou vystaveny dlouhodobému mechanickému namáhání, např. v převodovkách.



Obr. 6. Řez elektronovou hustotou v minerálu diopsidu $\text{CaMg}(\text{SiO}_3)_2$. Zhuštění izolinií odpovídá přítomnosti atomu s více elektrony (v tomto případě vápníku).

Nezastupitelné místo má krystalografie i v jiných oborech – například geologii, farmakologii, biologii, chemii, kriminalistice, analýze uměleckých předmětů, archeologii a mnohých dalších. O tom, že krystalografie je dynamicky se rozvíjející věda, svědčí i počet Nobelových cen, které vědci v souvislosti se strukturou látek doposud obdrželi – celkem je jich už 29, z toho deset za fyziku, osmnáct za chemii a jedna za medicínu (určení struktury DNA).

Krystalografické laboratoře najdeme na všech kontinentech naší planety. Dokonce i mimo ni. Zatím nejvzdálenější krystalografická laboratoř se nachází desítky miliónů kilometrů daleko. Jedná se o výzkumné vozítko Curiosity, které na povrchu rudé planety přistálo roku 2012. Ve svých útrobách má přes desítku aparatur pro fyzikální, chemické a biologické experimenty. Mezi ně patří i rentgenová difrakce spolu s rentgenovou fluorescenční spektroskopií (XRF). A tak dnes krystalografie pomáhá odhalovat i tajemství jiných světů.

9. Česká krystalografie

U příležitosti tak významného jubilea je vhodné připomenout český příspěvek k rozvoji krystalografie. Tato disciplína je úzce spjata s rentgenovým zářením, se kterým se začalo záhy po jeho objevu experimentovat i v Čechách. První monografie o paprscích X z pera prof. Václava Posejpalu (1840–1935) vyšla pod názvem *Roentgenovy X paprsky* už roku 1925. O čtyři roky dříve se Posejpalovým asistentem stal Václav Dolejšek, který se svým objevem velmi slabých rentgenových spektrálních čar série N u prvků U, Bi a Th významně podílel na rozvoji rentgenové spektroskopie. Tímto objevem napomohl i rodící se kvantové mechanice, neboť se prokázalo, že se spektra

v jiných oblastech elektromagnetického záření řídí stejnými zákonitostmi jako spektra atomů ve viditelném světle. Dolejškovými žáky se stali Adéla Kochanovská, Miloslav Valouch a Vilém Kunzl. Čestné místo mezi nimi svým zásadním příspěvkem k rozvoji oboru zaujímá Adéla Kochanovská. Po uzavření vysokých škol během 2. světové války rozvíjela metody studia struktury látek v pražských Škodových závodech. Pořádala pravidelná setkání krystalografů na konferencích s názvem *Rozhovory o aktuálních otázkách v rentgenové strukturální analýze*, které pokračují doposud (proběhlo jich již více než 250).⁷ Mezi dalšími významnými osobnostmi nesmíme zapomenout na Karla Tomana, autora první české publikace o vyřešení struktury krystalu [6], Allana Línka, konstruktéra prvního počítače určeného primárně k řešení krystalových struktur (jmenoval se ELIŠKA a je k vidění v Národním technickém muzeu) nebo Milenu Polcarovou, která výrazně přispěla k rozvoji rentgenové topografie. Podrobněji je historie používání rentgenových paprsků v Čechách nejen v oboru krystalografie popsána v článku [7]. Ve výčtu jmen by neměl chybět ani Vladimír Vand [5].

V současnosti patří čeští krystalografové mezi evropskou a světovou špičku. Například skupina dr. Václava Petříčka z Fyzikálního ústavu AV ČR, v. v. i., významně přispěla k řešení modulovaných a aperiodických struktur. Prof. Václav Holý a doc. Radomír Kužel z Matematicko-fyzikální fakulty UK jsou světově uznávanými odborníky v oboru rentgenové difrakce a strukturální analýzy. Vědecké týmy z Ústavu molekulární genetiky AV ČR, v. v. i., Ústavu makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i., a Ústavu anorganické chemie AV ČR, v. v. i., významně přispěly k řešení struktury viru HIV a přiblížily tak možnost přípravy nových druhů léčiv. Kolegové z ČVUT rozvíjejí možnosti uplatnění krystalografie a použití rentgenového záření v různých technických aplikacích, například v oboru studia tzv. reálné struktury. A tak bychom mohli pokračovat ještě v předlouhém výčtu. Krystalografii se v české kotlině rozhodně daří.

L i t e r a t u r a

- [1] BRAGG, W. L.: *The determination of parameters in crystal structures by means of Fourier series*. Proc. R. Soc. Lond. A 123 (1929), 537–559.
- [2] FRIEDRICH, W., KNIPPING, P., LAUE, M.: *Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen*. Ann. Physik 346 (1913), 971–988; LAUE, M.: *Eine quantitative Prüfung der Theorie für die Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen*. Ann. Physik 346 (1913), 989–1002.
- [3] International tables for crystallography, volume A: Space-group symmetry. 2006.
- [4] KLINGE, S., VOIGTS-HOFFMANN, F., LEIBUNDGUT, M., ARPAGAU, S., BAN, N.: *Crystal structure of the eukaryotic 60S ribosomal subunit in complex with initiation factor 6*. Science 334 (6058) (2011), 941–948.
- [5] ŠOLCOVÁ, A., KRÍŽEK, M.: *Nobelova cena na dosah – zapomenutý osud fyzika Vladimíra Vanda*. PMFA 53 (2008), 7–21.
- [6] TOMAN, K.: *The structure of NiSi*. Acta Crystallogr. 4 (1951), 462.
- [7] VALVODA, V.: *Rentgenová difraktometrie včera a dnes*. PFMA 41 (1996), 95–101.

⁷V současné době organizuje *Rozhovory* Krystalografická společnost, která vznikla roku 1991 a sdružuje české a slovenské krystalografy. Více na www.xray.cz