Z HISTORIE KRYSTALOGRAFIE NA ÚZEMÍ BÝVALÉHO ČESKOSLOVENSKA[3]

(osobnosti, instituce, reflexe světového vývoje a původní výsledky)

Ludmila Dobiášová[1]✝, Emilie Těšínská[2], Václav Valvoda[1], Radomír Kužel[1]

[1]Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2
[2]Archív AV ČR, V Zámcích 56/76, 181 00 Praha 8

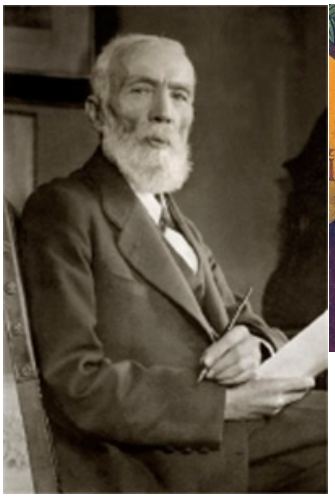
Vedle dobře známého působení Johanna Keplera v Praze (podrobněji viz [1]) lze z rané historie krystalografie v českých zemích připomenout také např. německého chemika **Friedricha Augusta Kekulého** (1829-1896), jehož předci pocházeli ze Stradonic nedaleko Slaného. V článku z r. 1865 předložil Kekulé hypotézu o struktuře benzenu v podobě prstence šesti uhlíkových atomů se střídajícími se jednoduchými a dvojnými vazbami. [2] Tato představa umožnila mj. vysvětlit poměr uhlíku a vodíku v benzenu (1:1).

Kekulé von Stradonitz

Friedrich Reinitzer

S českými zeměmi, se jménem chemika **Friedricha Reinitzera** (1857-1927), je úzce spojen také objev kapalných krystalů. F. Reinitzer se narodil v Praze, v německé rodině. Vystudoval chemii na pražské německé technice, kde se v r. 1883 habilitoval a v r. 1888 byl jmenován mimořádným profesorem pro botaniku, zbožíznalství a technickou mikroskopii. V r. 1895 odešel z Prahy na techniku do Štýrského Hradce. Během pražského působení se zabýval výzkumem chemických látek rostlin. V publikaci o cholesterolu z r. 1888 popsal mesomorfní fázi pozorovanou při tání látek cholesterolového typu cholesterolacetátu a cholesterolbenzoátu. V práci stanovil také správný sumární vzorec cholesterolu $C_{27}H_{46}O$. [3] S popisem pozorovaných krystalických proměn a vlastní hypotézu výkladu se tehdy obrátil na předního odborníka na problematiku krystalů a jejich fázových přechodů, německého fyzika Otto Lehmanna. Ten podal fyzikální výklad jevu a navrhl termín kapalné krystaly.

Mocným nástrojem pro studium krystalových struktur se stalo rentgenové záření. První využití nalezly tzv. paprsky X, objevené Conradem Wilhelmem Rőntgenem koncem r. 1895, v lékařské diagnostice. Expozice potřebné k získání prvých rentgenových snímků ruky však musily být, při nízkém výkonu prvých zdrojů rentgenového záření, až hodinové. (Viz např. [4].)



Ivan Puluj

Zmínku o prvých pokusech s Rőntgenovými paprsky X, které konal na německé technice v Praze profesor fyziky a elektrotechniky ukrajinského původu **Ivan Puluj** (1845-1918), lze nalézt také v pražských reflexích novináře a spisovatele Egona Ervina Kische. V jeho knize „Tržiště senzací“ se uvádí: “*Hned potom, co se roznesla zpráva, že v Německu vynalezl profesor W. C. Röntgen paprsky X, uspořádal fyzik pražské německé Vysoké školy technické, profesor Ivan Puluj o nich přednášku s pokusy, aniž se svým objevem šel na veřejnost. Nyní předváděl přístroje, které sám zkonstruoval, prosvítil na podiu nedobytnou pokladnu, psa, muže, ba i ženu, ovšem maskovanou.*” [5]

První operaci opírající se o diagnostiku rentgenem provedl na pražské české univerzitě 12. ledna 1897 chirurg Karel Maydl (1853-1903), profesor a přednosta chirurgické kliniky. Ze žaludku pacienta tehdy vyjmul pacientem spolknutý hřebík. (Podrobněji viz [1].)

3 Článek je upravený a místy rozšířený text L. Dobiášové, který vyšel v Materials Structure 7 (2000) 24-38 u příležitosti výstavy Struktura mikrosvěta v Národním muzeu a také článek E. Těšínské v Materials Structure, 6 (1999) 67-68.

Bohuslav Ježek

František Záviška

Václav Posejpal

O objevu difrakce rentgenového záření na krystalech, který stál u počátku rentgenové strukturní analýzy, referoval v r. 1913 mezi prvými Časopis pro pěstování matematiky a fysiky. [6] O rok později, na V. sjezdu českých přírodozpytců a lékařů v Praze již A. Hlaváček referoval o tom, že „*souvislost těchto ohybových zjevů se změnami struktury hmoty počal společně s Dr. P. Růžkem experimentálně sledovati na určitých případech.*“

Do rozvoje strukturní krystalografie ve světě i v českých zemích zasáhla první světová válka. Průkopníkem rentgenometrie krystalů v českých zemích se po první světové válce, po návratu z bojiště, stal mineralog a krystalograf **Bohumil Ježek** (1877-1950). První laueogramy krystalů získal ve spolupráci s fyzikem **Karlem Teigem** (1900-1951) v Ústavu pro teoretickou fyziku na Karlově (české) univerzitě v Praze. Přednostou ústavu byl **František Záviška** (1879-1945), teoretický fyzik, který se v počátcích profesní kariéry sám experimentálně zabýval rentgenovým zářením: během studijního pobytu v Cavendishově laboratoři v Cambridgi ve šk. r. 1906/07 studoval vliv silného rentgenového záření na kondenzaci vodních par. V letním semestru 1914 pak vypsal na pražské české univerzitě jako první fyzikální přednášku „*O paprscích Rőntgenových*“ (v rozsahu 2 hodin týdně).

B. Ježek a K. Teige zařadili do výuky na pražské české (Karlově) univerzitě jako první rentgenometrii krystalů: B. Ježek vypsal v zimním semestru 1922/23 poprvé přednášku nazvanou „*Souměrnost a rőntgenometrie krystalů*“ (1 h.). K. Teige v zimním semestru 1923/24 připojil přednášku „*Atomová teorie krystalových mřížoví*“ (2 h.) a B. Ježek svou přednášku doplnil (pro omezený počet účastníků) „*Samostatnými prácemi rőntgenografickými*“ (6 h.). Od letního semestru 1923/24 vypisovali Ježek a Teige společně „*Cvičení rőntgenografické a rőntgenometrické*“ (3 h., konalo se v Ústavu pro teoretickou fyziku). Po odchodu B. Ježka na Vysokou školu báňskou do Příbrami převzal jeho přednášky a cvičení v rentgenometrii krystalů na Karlově univerzitě od šk. r. 1928/29 mineralog František Ulrich (1899-1941). F. Ulrich se do oboru strukturní krystalografie zapracoval již během studijního pobytu u V. M. Goldschmidta na univerzitě v Oslo ve šk. r. 1924/25. V Mineralogickém ústavu UK pak zařídil moderně vybavenou rentgenometrickou laboratoř. Za války však byla Němci zcela zničena; F. Ulrich zahynul 21. října 1941 na následky zranění při zatýkání gestapem.

B. Ježek vydal v r. 1923, u příležitosti desetiletí od Laueho objevu difrakce rentgenového záření na krystalech, spisek „*Nástin rőntgenometrie krystalů*“. V jeho závěru shrnul dosavadní rozvoj oboru slovy: „*Prvních deset roků rőntgenometrie přineslo znamenité výsledky, ačkoli vlastně můžeme počítati plně jen první dvě léta předválečná a ostatní až do dnes jistě ne ani polovinou. V řadě vynikajících pracovníků v rőntgenometrii nenašli bychom mnoho přes tucet jmen. Jest to věc celkem obtížná, jež vyžaduje u krystalografa vědomosti fysikální, u fysika krystalografické a u obou matematické, jest to ale především věc finančně nákladná, které se daří hlavně tam, kde jest podporována průmyslem. Tak to jest v poraženém Německu, které by se asi mohlo vykázati nejlepšími praktickými výsledky. A u nás? U nás musíme vysloviti skromné přání, abychom mohli rőntgenometrii započíti u nás alespoň v jedenáctém roce jejího trvání.*“ [8]

V r. 1925 vyšla první česká fyzikální monografie „*Roentgenovy paprsky*“ z pera profesora experimentální fyziky na Karlově univerzitě **Václava Posejpala** (1874-1935). Vydala ji Jednota českých matematiků a fyziků. [9] V. Posejpal se v několika svých pojednání z přelomu 20. a 30. let minulého století zabýval speciálně také absorpci v oboru rentgenového záření.

V návaznosti na začlenění rentgenové strukturní krystalografie do univerzitní výuky se tato problematika v meziválečném období objevila i v několika doktorských disertacích. Téma rentgenových paprsků poprvé explicitně zaznívá v názvu disertace Rudolfa Šimůnka (nar. 1892) „*Interference Roentgenových paprsků*“, která byla předložena na filozofické fakultě pražské české univerzity ve šk. r. 1916/17. Posouzení disertace bylo přiděleno profesorům F. Záviškovi a Bohumilu Kučerovi, který patřil k českým průkopníkům výzkumů přírodní radioaktivity. Ve šk. r. 1919/20 byla na filozofické fakultě pražské české univerzity předložena doktorská disertace Anny D. Kašparové (nar. 1884) s názvem „*Krystalografické zkoumání některých sloučenin*“; autorka se však ve své práci omezila na klasické krystalografické metody.

Václav Dolejšek

Se systematickým studiem rentgenového záření začal na Karlově univerzitě **V. Dolejšek** (1895-1945). Hlavní pozornost soustředil na rentgenovou spektroskopii. Již během studijního pobytu u Manne Siegbahna na univerzitě v Lundu, ve Švédsku, ve šk. r. 1921/22, objevil v rentgenových spektrech těžkých prvků (uranu a thoria) čáry do té doby neidentifikované série N. Předběžné sdělení o objevu uveřejnil v časopise *Nature*, v čísle z 6. května 1922. [10] Podrobné sdělení o objevu vyšlo téhož roku v časopise *Zeitschrift für Physik*. [11] Na základě návrhu J. Heyrovského a V. Dolejška bylo v r. 1929 v Ústavu pro fyzikální chemii UK vytvořeno samostatné oddělení pro rentgenospektroskopii. V r. 1931 bylo přeměněno v Spektroskopický ústav UK, s řádnou roční dotací. V r. 1936 ústav přesídlil do budovy Fyzikálního ústavu UK v ulici Ke Karlovu 5.

Spolupracovníci prof. Dolejška na střeše Chemického ústavu na Albertově (kolem r. 1935). V první řadě zleva: Dr. V. Havlíček, Dr. A. Kochanovská, prof. V. Dolejšek, Ing. M. Tayerle. Ve druhé řadě zleva: F. Vilím (sedící) Dr. V. Vand, Ing. J. Němec, Dr. J. Klein, Ing. J. Slavík, Doc. A. Bláha, Dr. J. Bačkovský (z Čes. Čas. Fyz. A34 (1984), J. Bačkovský).

V listopadu 1934 byl z iniciativy J. Heyrovského a V. Dolejška zřízeno společné pracoviště *Spektroskopického ústavu UK a Škodových závodů v Plzni*, tzv. ***Fyzikální výzkum Škodových závodů***, který propojoval základní a aplikovaný výzkum. V jeho čele stáli V. Dolejšek (za Spektroskopický ústav UK) a Vítězslav Havlíček (za Škodovy závody). Pracoviště bylo financováno Škodovými závody; již v prvním roce zřídily Škodovy závody v rámci tohoto pracoviště dvě pracovní místa pro fyziky vysokoškoláky. Fyzikální výzkum ŠZ sídlil zpočátku v prostorách Spektroskopického ústavu UK. V činnosti pokračoval i po uzavření českých vysokých škol, musil se však přestěhovat do budovy bývalé autoopravny v Praze na Smíchově. Ke konci války byla část pracoviště delimitována do Příbrami. Po válce prošlo pracoviště několika reorganizacemi, 1. lednu 1953 se stalo součástí Ústavu technické fyziky ČSAV. Hlavním úkolem pracoviště bylo využití moderních fyzikálních poznatků a metod k řešení technických problémů Škodovky (nedestruktivní stanovení zbytkových napětí v kovových materiálech, fázová analýza slitin, určování textur apod.). Spolupráce se Škodovkou umožnila, že výzkum na tomto pracovišti nejen nebyl za okupace přerušen, ale měl dokonce finanční prostředky na nákup zařízení a zaměstnal také část pracovníků, kteří uzavřením českých vysokých škol ztratili zaměstnání.

Adéla Kochanovská-Němejcová

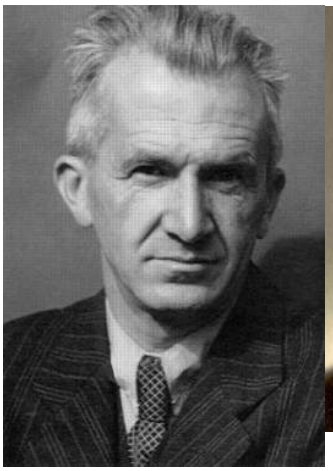
O rozvoj rentgenové difrakční analýzy v Československu se významnou měrou zasloužila **Adéla Kochanovská - Němejcová** (1907-1985). Patřila k žákům a spolupracovníkům V. Dolejška. Již v r. 1936, na žádost Škodových závodů zkoumala příčinu praskání obalů pancéřových granátů, protože se jednalo o vojenskou techniku, nemohly být výsledky publikovány. V r. 1944, poté, co byl V. Dolejšek zatčen gestapem, převzala A. Kochanovská vedení oddělení rentgenové mikrostrukturní analýzy ve Fyzikálním výzkumu ŠZ. Za války sepsala knihu „*Zkoušení jemné struktury materiálu rőntgenovými paprsky*“, kterou vydal tehdejší Česko-moravský svaz elektrotechnický. [12] Po válce napsala také skripta „*Radiokrystalografie*“, která jsou první čs. vysokoškolskou učebnicí oboru; skripta byla vydána v Bratislavě. [13] Spolu s kolegy řešila A. Kochanovská výzkumné úkoly pro průmyslové závody a lékařské kliniky a podílela se na školení rentgenových odborníků. Práce prováděné na žádost průmyslu, s cílem zdokonalení technologických procesů, dovedla využít k rozvoji strukturní rentgenografie i experimentální fyziky v širším smyslu. Za výsledky dosažené při studiu romboedrické modifikace grafitu a za vypracování rtg metody stanovení velikosti částic 10^{-2} – 10^{-4} cm jí byla v roce 1952 udělena státní cena. Z podnětu A. Kochanovské vznikly v dubnu 1954 také “***Rozhovory o otázkách v mikrorentgenu***”. Těchto jednodenních seminářů se zúčastňovali členové fyzikálních pracoviš ČSAV, vysokoškolští pracovníci i pracovníci z průmyslových výzkumných ústavů. Náplní seminářů byly přednášky z teorie i praxe rtg difrakčních metod, pozornost byla věnována také novinkám v odborné literatuře a v Československu vyráběným zařízením. Úzký kontakt pracovníků s výrobci při seminářích pomáhal rozvoji nových a zdokonalování stávajících zařízení pro rentgenovou strukturní analýzu. (Podrobněji viz [14].)

Spolupracovníci si A. Kochanovské vážili nejen pro její odborné znalosti, ale také proto, že „*neplýtvala slovy, nezvyšovala hlas, neměla ve zvyku kázat nebo poučovat. Byla mimořádně tolerantní a své spolupracovníky uznávala jako individuality. Pod jejím vlivem člověk nabýval sebedůvěry.*“ [15]

Na Masarykově univerzitě v Brně patřil k pionýrům rentgenové strukturní analýzy v meziválečném období **Antonín Šimek** (1887-1942), profesor a přednosta Ústavu fyzikální chemie. [16] Společně s H. Kadlcovou pozoroval, že kapka roztaveného TeO_2 se na proužku platinového plechu, kterým procházel stejnosměrný proud, zvolna přemis uje. Jev nazval „elektrokinetickým“. Pro vyřešení struktury zkoumané látky sestavil spolu s asistenty B. Stehlíkem a L. Balákem experimentální zařízení – rtg zdroj a komůrku pro otáčený monokrystal. Vyhodnocení a publikaci výsledků přerušila válka a uzavření českých vysokých škol. A. Šimek zahynul 7. května 1942 v koncentračním táboře Mauthausen. Výsledky, byly publikovány po válce a představují první strukturu vyřešenou z monokrystalových dat v Československu. [17]

Mezi osobnosti, které přispěly k rozvoji československé krystalografie, patří také fyzikální chemik **Jan Böhm** (1895-1952). Pocházel ze smíšené česko-německé rodiny. Z otcova rozhodnutí chodil do německých škol. Po maturitě na německém státním gymnáziu v Českých Budějovicích začal studovat chemii na německé technice v Praze. Po přerušení studia v důsledku vojenské služby za první světové války pokračoval ve studiích na pražské německé univerzitě. V r. 1921 odjel do Berlína, kde získal místo asistenta v *Kaiser-Wilhelm Institut für physikalische Chemie und Elektrochemie*, v jehož čele stál Fritz Haber. V Berlíně dokončil nejprve práci o vazbě vody v zeolitech, v níž se opíral o rentgenoskopická měření. Práci předložil jako doktorskou disertaci. Pokračoval studiem struktury krystalických látek pomocí rtg záření a byl jmenován vedoucím nově zřízené laboratoře pro tento výzkum. Zkoumal strukturu hydroxidů železa a hliníku; na jeho počest byl –AlO(OH) pojmenován „böhmit“. V r. 1926 zkonstruoval rentgenový goniometr s otáčeným krystalem, podle principu navrženého K. Weissenbergem (tzv. Weissenberg – Böhmův goniometr). [18]

V červnu 1926 byl J. Böhm vyslán do Ústavu teoretické fyziky do Kodaně, aby společně s G. Havesym proměřil rentgenová spektra některých prvků. G. Hevesym pak odešel na univerzitu ve Freiburgu, kde se v r. 1931 habilitoval a v r. 1934 získal titul mimořádného profesora. Jako přesvědčený demokrat měl však v nacistickém Německu stále obtížnější pozici. Havesy proto tehdy požádal J. Heyrovského, aby Böhmovi pomohl získat vysokoškolské místo v Praze. Na základě doporučení a intervence J. Heyrovského a V. Dolejška byl J. Bőhm s účinností od 1. října 1935 jmenován profesorem a přednostou Ústavu fyzikální chemie na pražské německé univerzitě. Šlo o profesuru, která byla již řadu let neobsazena. Projevům nepřátelství ze strany nacistických kolegů však musil čelit i na pražské německé univerzitě. Po uzavření českých vysokých škol dosáhl toho, že J. Heyrovský mohl pokračovat ve vědecké práci ve své laboratoři v Němci zabraném Ústavu pro fyzikální chemii Karlovy univerzity. Po osvobození, v květnu 1945, se pak zase J. Heyrovský zasadil o propuštění J. Bőhma a jeho



Jan Böhm

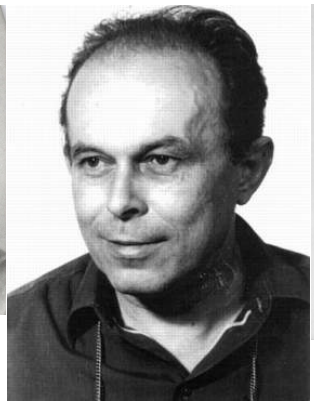
Vladimír Vand

rodiny z internace a jejich vyjmutí z odsunu. Od konce ledna 1946 byl J. Bőhm zaměstnán v Chemických závodech v Rybitví. I když mu to bylo nabízeno, na vysokou školu se již vrátit nechtěl. V r. 1952 byl jako jeden z prvých zvolen členem korespondentem nově zřízené ČSAV.

Petr Skulari (1892-1969) zřejmě jako první v Československu publikoval v r. 1937, rentgenografická měření mechanického napětí vzorků kovového hliníku a tepelně zpracovaného železa a oceli. [19] O dva roky později popsal své zkušenosti z rentgenografického určování zbytkových napětí ve svarech. [20] Za války sepsal monografii „*Rőntgenografie kovů a slitin*“, věnovanou aplikaci rentgenových difrakčních metod v metalurgii. Tiskem vyšla v r. 1947, vydal ji Československý odborný spolek slévárenský. [21] Zahrnuje technicky dokonalé a mimořádně instruktivní rentgenogramy válcovaných kovů a slitin. P. Skulari měl široké znalosti z fyziky kovů, metalurgie, metalografie i strojírenství. Díky tomu byl schopen vyvodit užitečné a spolehlivé informace již jen na základě vizuálního posouzení rentgenogramů. Počátkem druhé poloviny padesátých let se stal vedoucím skupiny rentgenové strukturní analýzy ve Výzkumném ústavu kovů v Panenských Břežanech. Jeden z členů této skupiny, **K. Toman**, v r. 1951 jako prvý autor z Československa uveřejnil článek v mezinárodním časopise *Acta Crystallographica*. [22]

Mezi pracovníky v krystalografii, kteří by neměli být v historickém ohlédnutí zapomenuti, patří také V. Vand a A. Línek. **Vladimír Vand** (1911-1968) se narodil v Sumě, v Rusku, českým rodičům. Otec působil v Rusku jako odborník na stavbu cukrovarů. Po Říjnové revoluci se rodina vrátila do Prahy. V. Vand absolvoval Přírodovědeckou fakultu UK, byl jedním z doktorandů V. Dolejška. Zajímal se však aktivně také o astronomii. Od r. 1935 pracoval společně s Antonínem Svobodou na vývoji radarů a zaměřovačů letadel na akustickém principu ve Škodových závodech. V roce 1938 utekl z okupovaného Československa do Anglie. Pracoval u firmy *Lever Brothers and Unilever Ltd.*, kde se začal zabývat krystalografií a reologií. Po válce se do Československa vrátil, v dubnu 1947 však Československo znovu a definitivně opustil. Na univerzitě v Glasgow se v r. 1950 zabýval krystalografií organických sloučenin. V r. 1953 do USA, na Pensylvánskou univerzitu, kde byl v r. 1961 jmenován profesorem

Alan Línek



Růžena Bubáková

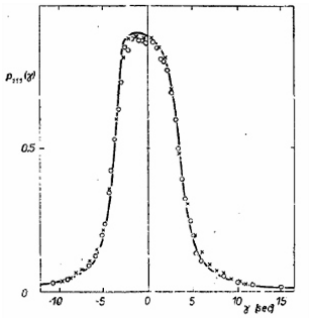
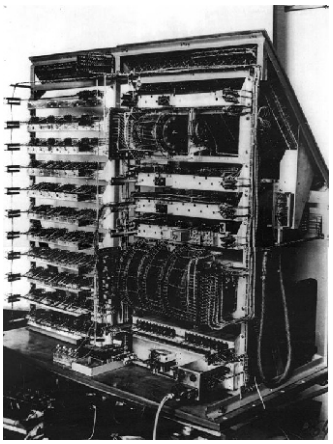


Fig. 6. Comparison of rocking curves for Si(111) in (3, 3, 1) position — points denoted ○ ○ ○, in (3, 3, −1) position — points denoted × × ×, and calculated triple-crystal function $p_{111}(\gamma)$ — full line.

krystalografie. Podílel se na založení *Groth Institute for the Classification of Information in Crystallography*.

Na experimentálním zařízení, které zůstalo po V. Vandovi ve Fyzikálním výzkumu Škodových závodů (Weissenberg-Böhmův goniometr a Debye-Scherrerova komůrka) začal po válce jako diplomant pracovat **Allan Línek** (1925-1984). A. Línek se zaměřil na řešení struktury piezoelektrického krystalu vinanu ethylen-di-aminu a na souvislost uspořádání atomů s jeho piezoelektrickými vlastnostmi. Pro automatizaci výpočtů byly ve spolupráci A. Línka s pracovníky Laboratoře matematických strojů vyvinuty a vyrobeny dva matematické stroje, z nichž každý měl sloužit k provedení části strukturně-krystalografických výpočtů. Ještě před realizací těchto strojů se A. Línkovi podařilo navrhnout, podomácku sestavit a zprovoznit malý jednoúčelový reléový stroj pro výpočet strukturních faktorů. Nazval jej ELIŠKA (E-ENIAC, první americký elektronkový počítač obrovitých rozměrů, LI-Línek, ŠKA-Škarda). Stroj byl využíván po několik let. Byl to první do provozu uvedený samočinný počítač, postavený v Československu; byl realizován o něco dříve než první československý univerzální počítač SAPO. Je uložen ve sbírkách Národního technického muzea v Praze a je dosud provozu schopný. Špičkovou úroveň měl ovšem i Weissenberg - Böhmův goniometr upravený podle připomínek A. Línka a jeho spolupracovníků a vyrobený ve Vývojových dílnách ČSAV; v roce 1958 byl vystaven na světové výstavě v Bruselu, spolu s modelem struktury vínanu ethylen-di-aminu, za jejíž vyřešení se A. Línkovi dostalo mezinárodního uznání.

V letech 1959-1960 byl v ČSAV uveden do chodu první samočinný elektronický počítač URAL I. Pro pracovníky v rentgenové strukturní analýze to předznamenalo začátek nového období v jejich práci, počítač se stal nedílnou součástí řešení vědeckých problémů.



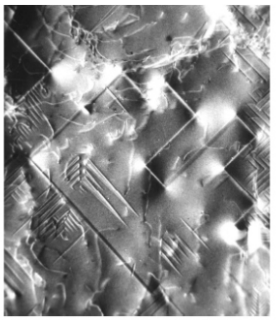
ELIŠKA

Novodobou historii oboru v šedesátých až devadesátých letech minulého století již utvářel mnohem větší počet pracoviš a osobností. V rámci tohoto příspěvku připomeneme alespoň několik z nich. Začneme Fyzikálním ústavem Akademie věd [23, 24] a jeho předchůdci (Ústav technické fyziky, později Ústav fyziky pevných látek ČSAV), kde pracovali již zmínění A Kochanovská, A. Línek a kde se krystalografii věnovalo několik laboratoří. Laboratoř pro zkoumání polykrystalických materiálů založila A. Kochanovská. Vedení laboratoře posléze převzal **Jan Čermák** (nar. 1926), který zde začal s výzkumem vlivu únavy na intenzity rentgenových difrakčních čar. Zkonstruoval únavový stroj, postavil rentgenový difraktometr, sestrojil achromatickou komůrku a vysokoúhlový rentgenový monochromátor.

Růžena Bubáková (1917-2003), kolegyně A. Línka, podala první experimentální důkaz platnosti dynamické teorie difrakce. Publikace R. Bubákové, J. Drahokoupila a A. Fingerlanda o teorii a aplikaci dvoj- a trojkrystalových difraktometrů [25] se staly jedním ze základních pilířů oboru dnes nazývaného „*high resolution X-ray diffraction*“ (difrakce s vysokým rozlišením). Později se zaměřila na dvojkrystalovou rtg topografii.

Milena Polcarová (1917-2003), další pracovnice Fyzikálního ústavu AV ČR, byla mezinárodně uznávanou kapacitou na poli rtg difrakční topografie. Její světově první zobrazení stěn magnetických domén [26] se dostalo do učebnic. Zabývala se studiem krystalových poruch především v křemíkovém eleze, ale i jiných materiálech (TGS, granátech, Si).

Milena Polcarová



Magnetické domény v Fe-6 at.% Si (obr. získaný Langovou topografií)

Josef Loub

Milan Rieder

Augustin Ondřej

Josef Šedivý

Václav Valvoda

Do oddělení strukturní analýzy v tehdejším Ústavu fyziky pevných látek ČSAV v roce 1972 nastoupil **Václav Petříček** (nar. 1948), který navázal na průkopnickou práci A. Línka a záhy se stal novou vůdčí postavou strukturní analýzy. [27]

U počátků krystalografie stála ve světě i u nás mineralogie. Mineralogický ústav Univerzity Karlovy byl personálně i materiálně tragicky postižen nacistickou okupací v době války. [28] Po osvobození v r. 1945 pokračoval pod vedením Františka Slavíka (1876–1957), který se vrátil z koncentračního tábora. O obnovu ústavu po válce se zasloužil především **Jiří Novák** (1902-1971). J. Novák se krystalografické problematice věnoval od studií na Masarykově univerzitě v Brně. Ve školním roce 1931/32 pracoval u V. M. Goldschmidta na univerzitě v Gőttingen a ve školním roce 1934/35 u mineraloga Charlese Mauguina na univerzitě v Paříži. Za války se zabýval také otázkou symboliky a jednotného názvosloví pro strukturní krystalografii. K jeho publikacím patří např. práce „*O proměnlivosti mřížkové konstanty křemene*“. [29]

J. Novák také v r. 1946 zastupoval Československo na prvním poválečném mezinárodním setkání krystalografů v Londýně, na němž bylo přijato rozhodnutí o zřízení Mezinárodní krystalografické unie v rámci Mezinárodní rady vědeckých unií (ICSU). Unie se konstituovala v r. 1948 a Československo se stalo v pořadí pátou členskou zemí, která k ní přistoupila. Oficiální oznámení o rozhodnutí geologického odboru tehdejší Čs. národní rady badatelské o přistoupení za člena Unie bylo výkonnému výboru Unie oznámeno 16. října 1948. J. Novák pak po řadu let vedl úřední agendu spolupráce s Unií. V letech 1957-1960 předsedal Čs. národnímu komitétu pro Mezinárodní krystalografickou unii. [30]

Z řady pracovníků Mineralogického ústavu UK lze zmínit také Lubora Žáka (1925-2008) a zejména **Milana Riedera** (nar. 1940), který přešel na Přírodovědeckou fakultu UK z Ústředního ústavu geologického a jehož hlavním zájmem byl výzkum minerálů ze skupiny slíd, spojený s monokrystalovou difrakcí na precesních komorách. M. Rieder byl i vynikajícím pedagogem, známý svými skvělými přednáškami. V Ústředním ústavu geologickém působil také **Karel Melka** (1930), který zastával také funkci vědeckého tajemníka Krystalografické společnosti. [31].

Josef Loub (1929) se významně zasloužil o rozvoj krystalografie a rtg strukturní analýzy na katedře anorganické chemie Přírodovědecké fakulty UK. [32]

Základy k významné mineralogické sbírce na Vysoké škole chemicko-technologické v Praze položil v roce 1835 **F. X. M. Zippe**. Sbírku dovedl k vrcholu **Augustin Ondřej** (1887-1956). Je mezinárodně uznávaná a to jak počtem kusů (cca 30 250), tak zastoupením ucelených kolekcí nerostů z různých genetických provincií světa /nová citace viz dole/. V roce 1945 byla na tehdejší katedře mineralogie zavedena metodika RTG difrakční fázové analýzy a její počátky jsou spojeny se jmény Jana Kašpara, Jaroslava Bauera a Vlastimila Seidla. Metodiku RTG strukturní analýzy zavedl na VŠCHT Praha v roce 1985 **Bohumil Kratochvíl** (1949). [33]

Rentgenová strukturní analýza byla také jednou ze základních aktivit katedry fyziky pevných látek ji od založení *Matematicko-fyzikální fakulty UK* v roce 1952. [34]. Vedoucím katedry byl Miloslav Valouch (1903-1976), který se zaměřoval na fyziku kovů, v této oblasti pracoval již v meziválečném období. Rentgenografické oddělení na katedře měl na starosti **Josef Šedivý** (1919-1992). Náplň práce tohoto oddělení navazovala na dřívější úspěšné působení prof. Kochanovské ve Fyzikálním ústavu Univerzity Karlovy v oblasti studia mikrostruktury polykrystalických materiálů. Josef Šedivý rozvíjel dlouholetou spolupráci s Výzkumným ústavem práškové metalurgiev Šumperku a také s Bergakademií ve Freibergu, kde několik let působil. Jeho nástupce **Václav Valvoda** (1937) rozšířil problematiku zejména na studim různých tenkých vrstev a multivrstev, zabýval se i deformačními elektronovými hustotami, difuzí atd. Po celou dobu se věnoval i propagaci krystalografie v Československu a organizaci národních i mezinárodních akcí v rámci činnosti Odborné skupiny ČSVTS - Studium jemné struktury materiálu ionizačním zářením, později Krystalografické společnosti, jejímž byl tajemníkem. Byl členem Mezinárodního střediska pro difrakční data (ICDD, USA). Napsal několik učebnic, zejména o krystalografii a strukturní analýze.

Na MFF UK také působil **Boris Gruber**, matematik, který nalezl algoritmus, jak zavést jednoznačně primitivní buňku mříže pomocí geometrických rysů založených na extremálních principech (1989). [35]

Dalším významným pražským pracovištěm technicky zaměřené krystalografie se stala laboratoř rtg difrakce zřízená po r. 1960 při *katedře fyziky inženýrství pevných látek na Fakultě technické a jaderné fyziky (od r. 1968 Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská)* ČVUT. Laboratoř se zaměřila zejména na měření deformací. Známou se stala především studiem zbytkových napětí. [36] Laboratoř úzce spolupracovala s A. Kochanovskou. Hlavní osobností

Stanislav Vratislav

Ivo Kraus

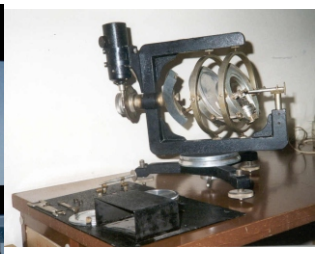
tohoto pracoviště se stal **Ivo Kraus** (nar. 1936), který rovněž napsal řadu učebnic a monografií. (viz např. [37].) U zrodu pracoviště stály též Galina Gosmanová a Rudolfa Králová. Z podnětu Č. Šimáně vznikla na téže katedře v roce 1967 také laboratoř neutronové difrakce. Ta je spojena zejména s osobou **Stanislava Vratislava** (1939).

Karel Huml

Významným pracovištěm se stal v šedesátých letech i *Ústav makromolekulární chemie Akademie věd* [38]. Oddělení difraktometrie vedl Karel Toman, autor první československé mezinárodní publikace s vyřešenou strukturou. Řadu let působil v oddělení **Karel Huml** (1934), který se zabýval strukturní analýzou a statistickými metodami. V letech 1991-1994 byl předsedou Evropského krystalografického výboru a velmi intenzívně pracoval ve výpočetní komisi Mezinárodní krystalografické unie - IUCr (1971-1997). Pracuje zde i **Jindřich Hašek** (1945), dlouholetý předseda Krystalografické společnosti. Vznikla zde první laboratoř maloúhlového rozptylu u nás (J. Pleštil, J. Baldrian).

V ***Bratislavě*** se významným místem pro rozvoj krystalografie stal *Ústav anorganické chemie SAV* [39, 40] a vedoucí osobností oboru **Fero Hanic** (xxxx)**,** blízký přítel A. Línka. Od roku 1956, brzy po vzniku ústavu a po obhajobě kandidátské disertační práce v Praze na Ústavu technické fyziky (školitel Vladimír Syneček), vedl F. Hanic krystalografickou skupinu. Jeho zájmy byly velmi široké a zahrnovaly monokrystalovou i práškovou difrakci. Zkonstruoval i vlastní precesní komoru, která se v některých významných detailech lišila od Buergerova modelu a vyráběla se i komerčně. F. Hanic stál také u počátku výzkumu koordinačních sloučenin. Jeho žák a spolupracovník **Slavomil Ďurovič** (1929) ukázal, že struktura řady látek může být popsána pomocí vrstev atomů (tzv. OD struktury) a podrobně studoval způsoby tohoto popisu. V Bratislavě působili také Vlado Kupčík a Emil Makovický, kteří později emigrovali a stali se profesory - Makovický v Kodani (1972) a Kupčík v Göttingen (1978).

Fero Hanic



Precesní komora F. Hanice

Emil Makovický

Slavomil Ďurovič

Rok 1955 lze označit za rok zrodu moderní koordinační chemie na Slovensku. Tato tématika začala být rozvíjena na katedře anorganické chemie Chemické fakulty SVŠT v Bratislavě pod vedením Jána Gaža a je rozvíjena dodnes. [41] Hlavní pozornost zde byla věnovaná komplexům mědi. Na řešení struktur rtg strukturní se zaměřili především **Ján Garaj** (1934) a **Michal Dunaj-Jurčo** (1936).

Michal Dunaj-Jurčo

S touto skupinou od počátku spolupracovala skupina v Košicích. Tamní katedra anorganické chemie na Přírodovědecké fakultě (nyní P. J. Šafárika) vznikla v roce 1965 a využívala zpočátku externí učitele z Bratislavy. Strukturní tématiky se posléze ujal **Juraj Černák** (1956). [42]

Do sledované historie patří rtg laboratoř ve Východoslovenských ocelárnách Košice (nyní U.S. Steel), která byla založena v roce 1971. Soustřeďuje se vedle fázových analýz na studium textur (**M. Černík** (1960) [43]).

Jozef Ševčík

Ústav molekulární biologie SAV v Bratislavě byl první institucí v bývalém Československu, který se věnoval proteinové krystalografii a také určil první proteinovou strukturu (ribonukleázu ze *Streptomyces aureofaciens*) [44]. Hlavní osobností byl dr. **Jozef Ševčík** (1938).

V Brně se dále rozvíjela již zmíněná chemická krystalografie. Jedním z chemiků, který pochopil důležitost krystalografie pro experimentální chemii a neustále to zdůrazňoval ve svých přednáškách byl Karel Dostál, vedoucí katedry anor-

Zdirad Žák

Antonín Buchal

Zdeněk Weiss

Dagmar Krausová

ganické chemie a nasměroval tak svého asistenta **Zdirada Žáka** (1941), který pak spolupracoval se zmíněným F. Hanicem v Bratislavě a zasloužil se nejvíce o rozvoj strukturní analýzy v Brně. Z. Žákovi se podařilo do Brna pořídit první monokrystalový difraktometr - od firmy Kuma z Polska (později spojenou s Oxford Diffraction, nyní Agilent).

Historie rentgenostrukturní laboratoře odboru strukturní a fázové analýzy Ústavu materiálového inženýrství F. Píška na strojní fakultě Vysokého učení technického (VUT) v Brně sahá asi do roku 1956, kdy vznikla katedra nauky o materiálu na energetické fakultě VUT, postupně byla vybavena několika přístroji firmy Chirana a difraktometry. Problematika se zaměřovala na studium zbytkových napětí, plastické deformace v kovech a slitinách, fázové analýzy v těchto materiálech a je spojena zejména se jménem **Antonína Buchala** (1946). [45]

Významný příspěvek přinesla brněnská krystalografie do oblasti fyziky. Rozvíjela se na Fyzikálním ústavu přírodovědecké fakulty [46, 47], kde působil např. i **Martin Černohorský** (19xx) (později Ústav fyzikální metalurgie ČS AV), který se soustředil na vypracování postupu přesného měření mřížkových parametrů. Rtg laboratoř se stala součástí katedry fyziky pevné fáze (později Ústav fyziky kondenzovaných látek). Výraznou osobností se zde stal od šedesátých let **Josef Kuběna** (1935), který se v té době orientoval na analýzu profilů rentgenových difrakcí na polykrystalických materiálech a později přeorientoval skupinu na studium vlastností polovodičů modifikovaných implantací iontů, tedy studium defektů v monokrystalech a spolupráci s polovodičovým průmyslem. Rozvíjela se rtg topografie a po nástupu Václava Holého vícekrystalová difraktometrie, měření difuzního rozptylu.

Martin Černohorský

Josef Kuběna

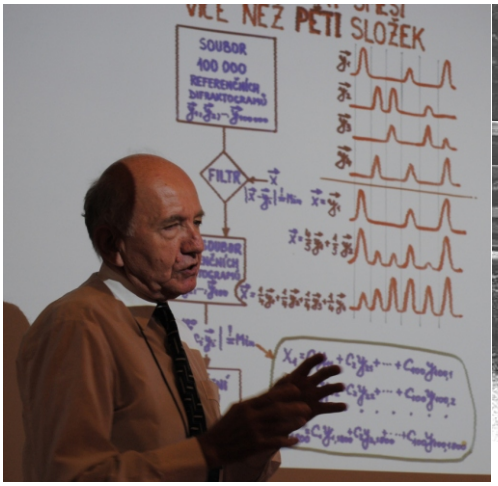
Zdeněk Weiss (1942-2005), byl řadu let hlavní osobností krystalografie v Ostravě, kde založil a vybudoval Výzkumný ústav chemie materiálů na VŠB-TU Ostrava, s přístrojovou technikou a odborným zázemím na světové úrovni. a věnoval se široké problematice od základního výzkumu v krystalografii a mineralogii až po materiálový výzkum s aplikacemi v ekologii a v celé řadě průmyslových odvětví. Nanomateriály, které vyvíjel na bázi modifikovaných jílových minerálů byly určeny k využití v ekologii jako sorbenty, dále jako konstrukční materiály na bázi nano-kompozitu polymer-silikát i pro optoelektronické aplikace jako laditelné laserové barvivo [48].

Rtg pracoviště katedry anorganické chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci vzniklo v roce 1965 a je spojeno především se jménem **Dagmar Krausové** (1946) a také **Jiřího Kameníčka** (1948). Problematika se zpočátku soustředila komplexy vzácných zemin s hydrokyselinami, komplexy prvků první přechodné řady, koordinační sloučeniny přechodných kovů. Významná byla spolupráce se soudním lékařstvím, studium žlučových kamenů [49].

Historie průmyslového využívání rtg difrakce ve Škodových závodech v Plzni se datuje do roku 1943, kdy Škodovy závody zakoupily pro svůj Pokusný ústav mikrostrukturní rentgenový přístroj Mikro 60 hamburské firmy C.H.F. Müller [50]. Analyzoval se zbytkový austenit v ocelích a karbidy resp. nitridy v isolátech; fázové složení slitin na basi mědi, hliníku a titanu; keramika (šamoty, dinas, vysocehlinité materiály, cordieritová keramika), sklokeramika (tavený čedič), plasty (polyamidy, polyetylen), materiály na basi uhlíku, korosní produkty, různé povlaky, nástřiky, nitridované vrstvy. S plzeňskou strukturní analýzou je nepochybně nejvíce spojeno jméno **Jaroslava Fialy** (1940), který je znám nejen svými pracemi z oblasti fázové analýzy, učebnicemi, ale i poutavými přednáškami.

Aplikace rentgenových metod v Kriminalistickém ústavu v Praze sahá do šedesátých let minulého století, kdy začaly první pokusy se zjiš ováním zkratových strukturních změn na elektrických vodičích. Po určité přestávce zde byly rentgenové strukturní metody znovu zavedeny v roce 1994, a to primárně pro analýzu minerálních fází zemin. [51]

Je nutné zmínit i historii neutronové difrakce na prcovištích v Řeži u Prahy [52]. Po asi tříletém budování, v r. 1965 uvedli R. Michalec, B. Chalupa, J. Vavřín a J. Vávra v Ústavu jaderné fyziky ČSAV do provozu první



Jaroslav Fiala

Bohumil Chalupa, Milena Polcarová

Pavol Mikula

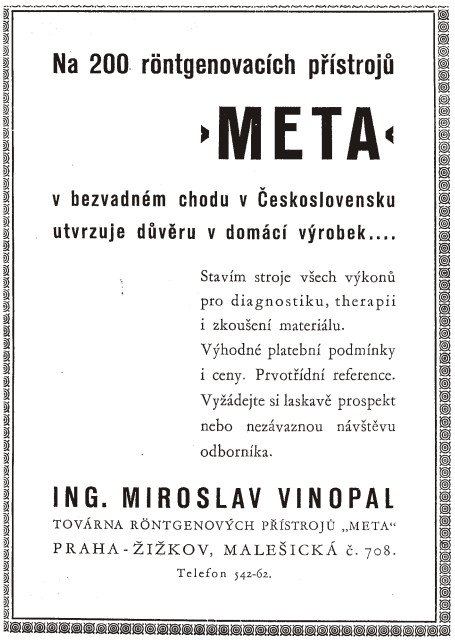
dvouosý difraktometr SPN-100 (Spektrometr polarizovaných neutronů), který byl na svou dobu na vynikající mechanické úrovni. Krátce po zahájení programu *Difrakce na feromagnetických dokonalých monokrystalech,* byla navázána spolupráce s profesoremV. Petržílkou, který inicioval zcela nový výzkumný program *Difrakce neutronů na ultrazvukem buzených kmitajících monokrystalech.* Později byl zakoupen z Polska další spektrometr využívaný ke studiu magnetických vlastností uranových sloučenin. V roce 1983 byly zahájeny první experimenty maloúhlového rozptylu a v letech 1986-87 byla vyvinuta vlastní aparatura pro neutronovou interferometrii. Vedle zmíněné problematiky byla v sedmdesátých letech věnována pozornost difrakci neutronů na elasticky deformovaných dokonalách krystalech. Skupina je již řadu let vedena **Pavlem Mikulou** (1947).

České výrobky po rentgenovou difrakci

První experimenty s rentgenovým zářením v českých zemích a na Slovensku, spadající ještě do doby Rakousko-Uherska a byly prováděny s improvizovaným vybavením školních fyzikálních kabinetů. Známé jsou rentgenové lampy Č. Strouhala nebo již zmiňovaného J. Puluje. První lékařské rentgeny na pražských lékařských klinikách byly zakoupeny koncem z Německa. Několik nadšených lékařů-praktiků si zařídilo privátní „rentgenový kabinet“ na základě informací z literatury a s pomocí místními řemeslníků. Jedním z nich byl MUDr. František Dreuschuch (1855-1938) z Náměšti nad Oslavou. Rentgenový přístroj si „postavil“ v letech 1898-1900 s pomocí strojvedoucího Kučky z Velkého Meziříčí.

Nejznámějším výrobcem rentgenové techniky po první světové válce se v Československu stala továrna na výrobu rentgenových přístrojů „META“. Firmu založil v r. 1922 Ing. Miroslav Vinopal. První dva rentgenové přístroje údajně vyrobil s jedním učněm a jedním mechanikem v činžovním bytě na Vinohradech v Lucemburské ulici. R. 1925 měla firma 14 zaměstnanců a 6 učňů; sídlila na Žižkově v Malešické ulici č.708. Na dobových prospektech byly její výrobky inzerovány jako “stroje všech výkonů pro diagnostiku, terapii i zkoušení materiálů“. V r. 1930 vzrostl již počet zaměstnanců firmy na 40, roční výroba přesáhla 200 ks rentgenových aparatur a obrat činil kolem 3.5 mil Kčs. V r. 1935 se firma META přestěhovala do Modřan; na ploše 700 m^2 tam pracovalo již 60 zaměstnanců. V roce 1948 byl závod META znárodněn a spolu 24 dalšími závody sloučen do národního podniku Závody léčebné mechaniky (od r. 1950 n.p. CHIRANA). [53]

Velký význam pro mnohostranné rozšíření a využití rentgenových difrakčních metod mělo zahájení výroby rentgenových přístrojů Mikrometa v n.p. Chirana. Kvalita a spolehlivost rentgenových zdrojů Mikrometa, původní vyřešení centrování rentgenek a upevnění difrakčních komůrek přímo na kryt rentgenky urychlilo strukturní analýzy. Iniciátorem této výroby v Chiraně byl František Khol (1915-199?). Vystudoval matematiku a fyziku na Přírodovědecké fakultě UK v Praze. Po uzavření českých vysokých škol nejprve učil na školách v Čachovicích u Mladé Boleslavi a v Přerově. V r. 1942 nastoupil do Fyzikálního výzkumu Škodových závodů, kde spolupracoval s A. Kochanovskou. V r. 1950 se stal zaměstnancem nově zřízeného Výzkumného ústavu materiálu a technologie, v r. 1966 odešel do Výzkumného ústavu radiotechniky a elektrotechniky.


Na 200 röntgenovacích přístrojů

›META‹

v bezvadném chodu v Československu utvrzuje důvěru v domácí výrobek....

Stavím stroje všech výkonů pro diagnostiku, therapii i zkoušení materiálu.
Výhodné platební podmínky i ceny. Prvotřídní reference.
Vyžádejte si laskavě prospekt nebo nezávaznou návštěvu odborníka.

ING. MIROSLAV VINOPAL
TOVÁRNA RÖNTGENOVÝCH PŘÍSTROJŮ „META“
PRAHA-ŽIŽKOV, MALEŠICKÁ č. 708.
Telefon 542-62.

Literatura

1. L. Dobiášová, E. Těšínská, R. Kužel, Materials Structure, 21 (2014), 3-6.
2. A. Kekulé: Sur la constitution des substances aromatiques, *Bulletin de la Société Chimique de Paris* 3 (1865), 98–110.
3. H. Reinitzer: Beiträge zur Kenntniss des Cholesterins, *Monatshefte f. Chemie u. verwandte Theile anderer Wissenschaften* 9 (1888), 421-441.
4. Národní listy 7. 1. 1896.
5. E. E. Kisch: *Tržiště senzací*, český překlad, 4. vydání Praha 1963.
6. Časopis pro pěstování mathematiky a fysiky 42 (1913).
7. A. Hlaváček, in: *Věstník V. sjezdu českých přírodozpytců a lékařů*, Praha 1914.
8. B. Ježek: *Nástin rőntgenometrie krystalů*, Praha 1923 (citace ze s. 28-29).
9. V. Posejpal: *Roentgenovy paprsky*, Praha 1925.
10. V. Dolejšek: On the N-Series in X-Ray Spectra, *Nature* 109 (1922), 582 (Letters to the Editor).
11. V. Dolejšek, Über die N-Serie der Röntgenspektren, *Zs. f. Physik*, 10 (1922), 129-136.
12. A. Kochanovská: *Zkoušení jemné struktury materiálu rőntgenovými paprsky*, 1. vydání Praha 1943.
13. A. Kochanovská: *Radiokrystalografie*, Bratislava 1952.
14. Z. Šperling, Materials Structure 10 (2003), 115-116
15. J. Drahokoupil, *Pokroky MFA* 32 (1987), 6.
16. Z. Žák, Materials Structure, 10 (2003) 117.
17. B. Stehlík, L. Balák, *Chemické zvesti*, **2** (1948), 6-12, 33-45, 69-79.
18. J. Bőhm, *Z. Phys*. 39 (1926) 557-?.
19. P. Skulari: *Vojenské technické zprávy, 14* (1937), 156.
20. P. Skulari, *Strojnický obzor,* 19 (1939), 19, 232.
21. P. Skulari: *Rőntgenografie kovů a slitin*, Brno 1947.
22. K. Toman. The structure of NiSi, Acta Cryst. 4, (1951) 462.
23. Z. Šourek, Materials Structure, 8 (2001), 100-103.
24. Z. Sourek, Materials Structure, 17 (2010), k9-k11.
25. R. Bubáková, J. Drahokoupil, A. Fingerland, *Czech. J. Phys B*, 11 (1961), 199-204; *Czech. J. Phys B*, 12 (1962), 764-775.
26. M. Polcarová, A. R. Lang, *Appl. Phys. Let*., 1 (1962), 13-15.
27. M. Dušek, Materials Structure, 17 (2010), k43-k46.
28. V. Goliáš, Materials Structure, 17 (2010), k35-k38.
29. J. Novák, *Věstník SGÚ*, 21 (1946), 231-236; viz též *Collection of Czechosl. Communications* 12 (1947), 193-197.
30. E. Těšínská, *Mezinárodní krystalografická unie a členství Československa*, rkp. příspěvku předneseného na Rozhovorech, duben 2014.
31. K. Melka, P. Ondruš, R. Skála, Materials Structure, 9 (2002), 64-66.
32. I. Císařová, Materials Structure, 8 (2001), 117-118.
33. J. Rohlíček, B. Kratochvíl, 17 (2010), k58-k59. a vscht.cz-mineralogie
34. V. Valvoda, Materials Structure, 8 (2001), 104-105.
35. B. Gruber, Acta Cryst, A45 (1989) 123-131.
36. I. Kraus, S. Vratislav, Materials Structure, 8 (2001), 108-111.
37. Ivo Kraus, Valerij Vasiljevič Trofimov: Rentgenová tenzometrie, Academia, Praha 1988, 247 str.
38. J. Hašek, Materials Structure, 17 (2010), k32-k34.
39. S. Ďurovič, Materials Structure, 8 (2001), 115-117.
40. Ľ. Smrčok, D. Gyepesová, S. Ďurovič, Materials Structure, 18 (2011) 227-228.
41. M. Koman, Materials Structure, 17 (2010), k60-k62.
42. J. Černák, Materials Structure, 18 (2011), 269-270.
43. M. Černík, I. Kohútek, A. Leško, Materials Structure, 18 (2011), 221-230.
44. J. Ševčík, Materials Structure, 18 (2011), 214-220.
45. A. Buchal, Materials Structure, 1, (1994), 45-46.
46. J. Kuběna, V.Holý, Materials Structure, 8 (2001), 106-107.
47. M. Meduňa, O. Caha, P. Mikulík, Materials Structure, 17 (2010) k22-k27.
48. P. Čapková, Materials Structure, 12 (2005), 67.
49. D. Krausová, J. Kameníček, Z. Trávníček, J. Walla, Materials Structur, 8 (2001), 67-73.
50. J. Fiala, R. Čerstvý, Materials Structure, 8 (2001), 114.
51. M. Kotrlý, Materials Structure, 17 (2010), k57.
52. P. Mikula, Materials Structure, 9 (2001), 52-64.
53. J. Marek, Materials Structure, 17 (2010), k5-k8.