



Structure of microworld - the world seen by invisible rays

STRUKTURA MIKROSVĚTA – SVĚT VIDĚNÝ NEVIDITELNÝMI PAPRSKY

L. Dobiášová

MFF UK, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2

2. 7. – 11. 10. 1998

Hollareum Národního muzea v Praze

Procházka výstavou

Abstract

The exhibition “Structure of Microworld - the World discovered by Invisible Rays” was held at the occasion of the 18th European Crystallographic Meeting in Prague.

The article guides the reader through the exhibition. The history of crystallography is presented by Agricola and J. Kepler and his famous treatise about snowflakes - the foundation of modern crystallography. The liquid crystals are mentioned because hardly anybody knows that they were discovered in Prague by F. Reinitzer in 1888. The specialists who deserved well of the crystallography advancement in the Czech Republic (V. Dolejšek, J. Böhm, A. Kochanovská, P. Skulari etc.) and the foundation of the Czech and Slovak Crystallographic Association are reminded. The examples of the contemporary X-ray diffraction research and the response of exhibition’s visitors close this short crystallographic walk.

Keywords: history of crystallography, crystallographic exhibition, history of the Czech and Slovak structure analysis, applications of crystallography

Úvod

Výstava „Struktura mikrosvěta – svět viděný neviditelnými paprsky“ byla uspořádána u příležitosti 18. Evropského setkání krystalografů v Praze (16. – 20.8.1998). Okouzlení magickou krásou krystalů, intelektuální zvědavost, zvládnutí řemesla - to jsou vlastnosti spojující vědce z doby minulé i současné. Před objevem paprsků X (8. 11. 1895 W. C. Röntgen) usuzovali vědci na vnitřní stavbu krystalů hledáním zákonitostí odvozených z jejich vnějších tvarů a fyzikálních vlastností. Objev paprsků, které zviditelňují skrytý svět a podávají zprávu o vnitřní stavbě hmoty, byl nejen senzací, ale vyžádal si i nový fyzikální a matematický přístup k rozluštění zprávy, kterou paprsky z mikrosvěta atomů přináší. Výstava představila malou hrst z kamínků, kterou do mozaiky poznání v oboru rentgenové difrakce přispěli a přispívají badatelé pracující v srdci Evropy.

Na přípravě výstavy se podíleli: M. Čepera, L. Dobiášová, J. Dušková, J. Hybler, A. Jegorov, I. Kraus, D. Krausová, B. Kratochvíl, J. Loub, J. Marek, P. Ondruš, M. Rieder, R. Skála, E. Těšínská, Výtvarný návrh: J. Michálek, J. Řehák, Scénář výstavy: L. Dobiášová. Výstava byla uskutečněna s podporou Krystalografické společnosti, Národního muzea, Archivu AV ČR a grantu PG 98136 MŠMT.



Obrázek 1. Z výstavy.

Národní muzeum

O realizaci snah pro založení Národního muzea jako vědecké instituce, která by systematicky budovala a zpřístupňovala přírodovědecké a historické sbírky, se zasloužil zejména hrabě Kašpar ze Šternberka (1761 - 1838). Dostalo se mu politické podpory nejvyššího purkrabího, hraběte Františka Libštejnského z Kolovrat, a tak se mohla 15. 4. 1818 uskutečnit zakladatelská schůze. Na budování muzea se podílely mnohé významné osobnosti tehdejšího kulturního a vědeckého života: F. Palacký, J. Dobrovský, J. Jungmann, V. Hanka, J. S. Presl, F. J. Gerstner a další. Sbírkby byly zpočátku soustředovány na několika místech v Praze. Roku 1819 získalo muzeum sídlo ve Šternberském paláci na Hradčanech, v r. 1845 se přestěhovalo do Nostického paláce na Příkopě. Podle projektů architekta J. Schulze (1840-1917) byl v letech 1885 - 1891 za částku 2 milionů zlatých vybudován na náklady českého sněmu palác, který se stal dominantou Václavského náměstí. Idea budovy přesáhla účel pouhého muzea. Palác se stal reprezentačním symbolem vrcholícího obrození českého národa. Ideovým centrem budovy se stal Panteon, glorifikující slavné epochy a postavy českých dějin. Zde byla také na slavnostní schůzi České akademie pro vědy, slovesnost a umění budována dne 18.5.1891 slavnostně uvedena do provozu.

Trochu historie, aneb již staří Řekové.

V žádném pojednání o dějinách krystalografie nechybí zmínka, že *kristallos* je slovo řeckého původu označující led, ledový kus. Tento význam má již v Homérových eposech Illias a Odysea z 8. století př.n.l. Řecké kultuře vděčí krystalografie nejen za své jméno, ale i za termín symetrie. Pojem symetrie zavedl pro vyjádření krásy a harmonie v přírodě i umění dnes už jen málokdy připomínaný kovolijec Pythagoras z Rhégia (5.stol. př.n.l.). Nejobsáhlejší přehled starověkých poznatků o krystalech vytvořil Gaius Plinius Secundus, zvaný Starší (23 - 79 n.l.), v encyklopedii *Naturalis historia*. Shrnul v ní na 20 tisíc údajů shromážděných ze 2 000 knih několika stovek řeckých a římských autorů. Kromě cenných závěrů z vlastních nebo převzatých pozorování z různých oblastí přírodovědy jsou v něm i fantastické myšlenky, např. o kamenech, které se rozmnožují jako živé bytosti. Jiná tvrzení získala naopak časem platnost obecných krystalografických zákonů: „*stěny krystalů jsou dokonale rovinné*“ (tzv. zákon rovinných ploch), „*různé látky krystalizují v různých krystalových tvarech*“. Gaius Plinius Secundus zahynul při pozorování výbuchu Vesuvu v roce 79 n.l.

Další významný spis, sepsaný německým učencem Agricolou. (Georg Bauer 1494 - 1555) se objevuje až v 15. století. Agricola za svého pobytu v Itálii navštěvoval



Obrázek 2. Hledání nerostů pomocí proutku

univerzitní přednášky z medicíny a zajímal se o terapeutické využití nerostů. To byl důvod, proč se ucházel o místo lékaře v Jáchymově. Za čtyřletého jáchymovského pobytu (1527-1531) vznikl první Agricolův mineralogicko - hornický spis. Od roku 1533 žil Agricola v Chemnitz, ale Jáchymov byl i nadále častým cílem jeho cest za poznáním neživé přírody. Agricola vytvořil svým dílem *De Re Metallica Libri XII* (Dvanáct knih o hornictví a hutnictví) vydaném v r. 1556 pevné základy hutnictví, hornicko-geologických věd i mineralogie. Bohatě ilustrovaná encyklopedie ukazuje, jak důležitou úlohu mají vlastní zkušenosti a pečlivý experiment v exaktních vědách. Agricola byl vynikajícím znalcem nerostů a jeho sbírka obsahovala nejen minerály všech evropských dolů, ale také

vzácné exempláře kamenů, které mu přiváželi kupci z Asie a Afriky. Jeho zásluhou začaly být k charakterizaci minerálů užívány takové znaky jako barva, hmotnost, lesk, chuť, průzračnost a vnější vzhled. Zejména ten měl být vyjádřen co nejnázorněji, aby i prostí horníci dovedli již pohledem minerály rozeznat. Agricola je pokládán za duchovního otce mineralogie, ale byl i lékařem, farmaceutem, politikem, diplomatem, filozofem a pedagogem. Nejstarším dochovaným písemným materiálem novodobé krystalografie je rozsahem nevelké pojednání *Strena seu de nive sexangula* (Novoroční dárek čili o hexagonálním sněhu), které za svého pobytu v Praze (1600 -1612) napsal matematik a astronom Johann Kepler (1571-1630) (Obr. 3).



Obrázek 3. Johann Kepler

Pro vznik díla bylo rozhodující Keplerovo přátelství s významnou osobností rudolfinské doby, císařským diplomatem Janem Matoušem Wackerem z Wackenfelsu. Traktát, věnovaný Wackerovi jako novoroční dárek v lednu 1611, je dokladem autorova prvenství v oblasti teoretické nauky o krystalech. V souvislosti s hledáním příčiny hexagonální souměrnosti sněhu dochází Kepler k významným poznatkům o geometrii nejtěsnějšího uspořádání tuhých koulí. V pojednání jsou diskutována i zobecněná prostorová uspořádání, a to nejen nejtěsnější, ale i ostatní, principiálně možná. Keplerovi také náleží priorita v zavedení tzv. koordinačních čísel vyjadřujících počet koulí dotýkajících se libovolné koule výchozí. Pokus objasnit tvar vloček jejich stavbou z kulovitých částic vody symetricky rozložených v prostoru lze chápat jako počátek teorie krystalové mřížky. Všiml si rovněž neměnnosti úhlů mezi analogickými stěnami a hranami sněhových vloček. Poznatek, zajišťující věhlasnému učenci prioritu v oblasti teoretické krystalografie zůstal však bez odezvy. Nevelký ohlas měly také empirické zkušenosti dánského anatoma a fyziologa Nicolause Stena (Nikolaj Stenon, Niels Stensen 1638-1686). Základem Stenových úvah jsou neobyčejně seriózní pozorování a měření, která provedl, i když disponoval jen těmi nejjednoduššími prostředky. K získání podkladů pro formulaci zákona o stálosti úhlů používal pouze tužku a papír, na který s mimořádnou pečlivostí obkresloval různé tvary krystalů křemene. „*Jak krystal vzniká nevíme. Jeho růst je však zcela pochopitelný. Neprobíhá zevnitř jako u rostlin, ale tím způsobem, že se na jeho*



vnější stěny ukládají jemné částice přinášené z vnějšíku kapalinou). Naposledy byl zákon konstantních úhlů objeven koncem 18.století. Jean B. Romé de l'Isle (1736- 1790) podložil tvrzení o *neměnnosti vzájemného sklonu stěn krystalů daného druhu* ve své *Krystalografii* velkým počtem měření, ke kterým použil příložený úhloměr. K upřesnění představy o růstu krystalů přispěl nejvýznamněji René J.Haüy (1743-1822). Na základě poznatku o štěpení krystalů vyslovil obecný princip: *různé formy určité krystalické látky v sobě obsahují stejný primitivní tvar, jádro, předurčené přírodou*. V r. 1824 vyslovil fyzik L.A. Seeber (1793-1855) již moderní teorii, že mřížka krystalu je vytvořena z atomů a nikoliv z molekul. Zákon o racionalitě indexů krystalových ploch zformuloval v r. 1839 W.H. Miller (1801-1880). V pracích fyziků F. Neumanna (1798-1895) a K.F. Naumanna (1797-1873) bylo zdůrazněno hlubší spojení struktury a vlastností krystalů. V r. 1830 odvodil J.F.C. Hessel (1796-1872) matematickou analýzou, že vnější symetrie jakéhokoliv krystalu musí odpovídat jedné z 32 oddělení (tříd) symetrie.



Obrázek 4. August Bravais

V r. 1850 popsal Auguste Bravais (1811-1863, Obr. 4) 14 typů geometrických obrazců tvořených body pravidelně uspořádanými v prostoru a dokázal, že body (částice) mohou být uspořádány v maximálně 14 typech prostorových mřížek, které dal do vztahu s třídami symetrie. M.L. Frankenheim (1801 - 1863) zavedl v r. 1856 bodovou transformaci, přičemž řešil otázku, zda druhy mřížek, které jsou geometricky možné, jsou přítomné v reálných krystalech. V r. 1891 dokázali J.Š. Fjodorov (1853-1919) a A. Schoenflies (1853-1928) nezávisle na sobě, že existuje 230 různých prostorových grup – symetrických možností uspořádání bodů v prostoru tak, aby okolí každého bodu bylo stejné.

Experimentální nástroj - paprsky X - k potvrzení teoretických úvah o vnitřním uspořádání látek dal krystalografům W.C. Röntgen. Wilhelm Conrad Röntgen (1845 - 1923, Obr. 5) nepatřil k úzce zaměřeným vědcům. U všech generací fyziků budí obdiv pro svou experimentální nápaditost založenou na širokém přírodovědném vzdělání a schopnosti nalézt mezi nepřehlednými fakty charak-



Obrázek 5. Wilhelm Conrad Röntgen

teristické rysy nových objevů. Po jeho třech postupně publikovaných sděleních (1895, 1896, 1897) o novém druhu paprsků X zůstala bez důkazů jen odpověď na otázku povahy nového záření. Max Theodor Felix von Laue (1879 -1960) se za svého působení v Mnichově seznámil s ideou krystalové mřížky v pracích Leonarda Sohncke a Paula von Grotha, i s hypotézou Arnolda Sommerfelda, že rentgenové paprsky jsou vlnami o střední délce 0.1 nm. Správnost obou představ potvrdil roku 1912 zcela jednoznačně historický pokus trojice W. Friedrich - P. Knipping - M. von Laue. William Lawrence Bragg (1890 -1971) vyjádřil matematicky podmínky difrakce rentgenových paprsků na krystalech jednoduchou rovnicí (Nature 90 (1912) 410). Nezávisle na něm zveřejnil článek o reflexní podmínce na krystalech i Jurij Viktorovič Wulff (1863 -1925), profesor na univerzitách v Kazani, Varšavě a od roku 1909 v Moskvě. (Physikalische Zeitschrift 14 (1913) 217).



Obrázek 6. Friedrich Reinitzer

Kapalné krystaly

Objev kapalných krystalů je spojen se jménem Friedricha Reinitzera (1857 -1927, Obr. 6).

F. Reinitzer pocházel z pražské německé rodiny a vystudoval chemii na německé technice v Praze. V roce 1883 se na ní habilitoval a přednášel zde jako soukromý docent. V roce 1895 odešel z Prahy na techniku do Štýrského Hradce, zřejmě v naději, že tam nalezne lepší

podmínky k vědecké práci. S historií kapalných krystalů je bezprostředně spojena Reinitzerova práce o cholesterolu z roku 1888. Popsal v ní nejen pozorování mezomorfni fáze cholesterolacetátu a cholesterolbenzoátu, ale určil i správný sumární vzorec cholesterolu $C_{27}H_{46}O$. (*Beiträge zur Kenntniss des Cholesterins*, Monatshefte für Chemie und verwandte Theile anderer Wissenschaften 9, 1888, 421 - 441). S cílem ujasnit chemickou podstatu látek cholesterolového typu sledoval pod mikroskopem jejich bod tání a krystalické změny. S výsledky svých pozorování, vlastní hypotézou výkladu a s žádostí o bližší prozkoumání jevů se obrátil na profesora fyziky v Aachen, Otto Lehmana, předního znalce krystalů, jejich fázových přechodů a autora termínu kapalných krystalů. Objev kapalných krystalů vzbudil ve své době nemalou pozornost. Specifickou odezvu měl ve vědách o životě např. u E. Haeckela, popularizátora evolucionismu a zapáleného monisty, který v Reinitzerově a Lehmannově objevu viděl další důkaz pro svou koncepci jednoty anorganického a organického světa. V časopise *Živa* z roku 1913 (iniciály F.Š.-k) se mj. uvádí...*pevný krystal je hmotou tuhou, jejímiž částicemi není možno pohnouti, aniž bychom jej nerozebrali a tím nezničili.....Za to tekutý krystal je jaksi živoucí, zříme ho deformovati se a opět nabývati původního tvaru o své vlastní újmě. Lehmann fotografoval a i kinematografoval všechny tyto zjevy, které jsou zajímavé nejen pro krystalografa. Ukazují, jak je stav krystalický mnohem složitější a bohatší na tvary, než se myslelo až dosud, že mezi krystalem a hmotou amorfní existuje nekonečný počet přechodných stavů. Biolog pak může čerpati z těchto pokusů také poučení a konstatovati, že jistý počet pohybů dějících se v živoucí buňce, jsou jen deformace této pseudo-krystalické hmoty.*

Protože kapalně krystalové v své době nenalezly praktické uplatnění, zájem o ně upadl. U nás toto téma znovu oživil fyzikální chemik H. Zocher, který v roce 1931 přišel na pražskou německou techniku z Berlína. Zabýval se optickými vlastnostmi nematických kapalných krystalů. Za války emigroval a od r. 1946 pak působil v Rio de Janeiro.

Do roku 1965 byla problematika kapalných krystalů okrajovou záležitostí, studovanou na univerzitách v Německu a ve Francii. V roce 1965 byl vyroben první displej na bázi kapalných krystalů. Šlo o typ, který využíval dynamického rozptylu světla. Přitom se ukázalo, že řada fyzikálních otázek souvisejících s chováním kapalných krystalů zůstala neobjasněna. To podnítilo zájem fyziků a ve Francii vznikla na univerzitě v Orsay skupina, která řešila otázky uspořádání a orientace molekul v kapalných krystalech, popsala jejich elasticitu a hydrodynamiku.

Rentgenová strukturní analýza v Československu

V zápětí po objevu v r. 1895, začali paprsků X užívat lékaři, i když zdroje záření měly tak malý výkon, že „*k docilení silhouety ruky bylo potřeba expozice až 1 hodinu trvajících*“ (Národní listy 7.1.1896).

O paprscích X píše E. E. Kisch v Tržišti senzaci: „*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, prosvítit na podiu nedobytnou pokladnu, psa, muže, ba i ženu, ovšem maskovanou.“ (Ukrajinec Ivan Puluj 1845 - 1918, profesor fyziky a elektrotechniky na pražské německé technice). 12.1.1897 pražský chirurg Karel Maydl provedl první operaci po diagnostice rentgenem u nás – odstranil ze žaludku spolknutý hřebík.

Na počátku rozvoje rentgenové strukturní analýzy v českých zemích bylo oznámení o objevu a následujících experimentech na stránkách *Časopisu pro pěstování matematiky a fyziky* v r. 1913. Zahraniční práce a objevy podnítily laboratorní výzkum a pokusy. A. Hlaváček uvedl na V. sjezdu českých přírodovědců a lékařů (1914), že „*souvislost těchto ohybových zjevů se změnami struktury hmoty počal společně s Dr.P. Růžkem experimentálně sledovati na určitých případech.*“ Průkopníkem rentgenometrie po návratu z bojiště první světové války se stal krystalograf a mineralog Bohuslav Ježek (1877 – 1950). První lauegramy jím byly údajně získány ve spolupráci s fyzikem Karlem Teigem v Ústavu teoretické fyziky při české univerzitě v Praze. K. Teige a B. Ježek jako první zařadili tematiku rentgenometrie krystalů do výuky na přírodovědecké fakultě české univerzity. Bohuslav Ježek se stal profesorem na Vysoké škole báňské v Příbrami. V r. 1923 vydal *Nástin röntgenometrie krystalů*, který uzavírá slovy: „*Prvních deset roků röntgenometrie 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 röntgenometrii nenašli bychom mnoho přes tucet jmen. Jest to věc celkem obtížná, jež vyžaduje u krystalografa vědomosti fyzikální, 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 u poraženém Německu, které by se asi mohlo vykázati nejlepšími praktickými výsledky. A u nás? U nás musíme vysloviti skromné přání, a bychom mohli röntgenometrii započítati u nás alespoň v jedenáctém roce jejího trvání.*“

Po proniknutí problematiky rentgenometrie do vysokoškolské výuky a laboratoří se objevily na pražské univerzitě i první doktorské disertace, věnované problematice rentgenového záření. V posudku na disertaci *Interference rentgenových paprsků* předloženou Rudolfem Šimůnkem ve školním roce 1916–1917 prof. F. Závíška napsal: „*Předložená dissertace se týká oboru zjevů objevených teprve před několika léty a důležitých po stránce teoretické i experimentální. P. kandidát podává v ní nejdříve původní teorie objevitele interference paprsků Röntgenových, Lauea, pak teorii Braggovu, a ukazuje dle Wulffa, jak obě teorie spolu souvisí. Výsledky teorii aplikuje na výpočet vlnové délky paprsků Röntgenových v jednoduchém případě; obšírněji pojednává o tom, jak oba Braggové užili interference Röntgenových paprsků velmi důmyslným způsobem ku stanovení struktury krystalů. V dalším probírá p. kandidát vliv tepelného pohybu na tento zjev, zjednodušiv si úvahy předpokladem, že atomy jsou seskupeny v bodovou řadu. Konec práce je věnován důležitým měřením Moseleyovým. Celá práce svědčí o tom, že p. kandidát ovládl dokonale tento obtížný a dosud neúplně zpracovaný obor; vyhovuje v něm podmínkám rigorosního řádu a může sloužiti k tomu, aby p. kandidát*



byl připuštěn k přísným zkouškám doktorským.”

V r. 1919–1920 následovala disertace Anny D. Kašparové *Krystalografické zkoumání některých sloučenin*. V úvodu autorka píše:

“V následující práci podávám výsledky prvního goniometrického zkoumání několika sloučenin většinou uměle připravených, prvních pěti: skandiumoxalatu, skadiumformiatu, ammoniumskadiumfluoridu, skadiumnatriumkarbonatu a manganiammoniumfluoridu p. prof. Drem. J. Štěrbou-Böhmem. Struvitu p. Jar. Bulířem, mléčnanu zinečnatého p. správcem V. Staňkem. Všem výše uvedeným pánům vydávám tuto za laskavě mi zapůjčený materiál srdečný dík.

Měření svá konala jsem v mineralogickém ústavě c.k. české university, jehož řediteli, panu prof. Dru. F. Slavíkovi srdečně a uctivě děkuji za laskavé rady a vzácnou ochotu, již po celou dobu práce mé mi projevoval.”

Mezi prvními pracovníky, kteří začali s aplikacemi rentgenova záření v krystalografii po roce 1918, byl i František Ulrich (1899 -1941), profesor mineralogie na české univerzitě v Praze. Autorem první české monografie o rentgenovém záření *Roentgenovy X paprsky* (1925) byl Václav Posejpal (1874-1935), profesor experimentální fyziky na české univerzitě v Praze. Se systematickým studiem rentgenového záření a jeho fyzikálně-technických aplikací začal profesor Václav Dolejšek (1895 -1945) a jeho žáci ve Spektroskopickém ústavu české university v Praze. V r. 1934 bylo zřízeno ze Spektroskopického ústavu a Škodových závodů společné pracoviště tzv. Fyzikální výzkum Škodových závodů. Hlavním úkolem jeho pracovníků bylo využití moderních fyzikálních poznatků a metod k řešení technických problémů Škodovky (nedestruktivní stanovení zbytkových napětí v kovových materiálech, fázová analýza slitin, určování textur ap.). Vedoucím Fyzikálního výzkumu a skupiny mikrostrukturní analýzy se stal prof. V. Dolejšek - profesor experimentální fyziky a ředitel Spektroskopického ústavu při české univerzitě v Praze (umístěného v podkroví budovy Chemického ústavu na Albertově). Odborného věhlasu dosáhl již v r. 1922 během studijního pobytu u M. Sieghbana na universitě v Lundu, objevem N-série v rentgenových spektrech uranu, thoria a vizmutu. Předběžné sdělení bylo uveřejněno v Nature r. 1922. Spolupracovníci V. Dolejška vzpomínají na jeho osobní kouzlo, kterým dovedl nejen upoutat zájem zejména mladých pro vědeckou práci, ale svým příkladem strhnout k obětavosti. Pro představu, jak byly vybaveny tehdejší laboratoře, citujeme ze vzpomínek akademika J. Bačkovského. “V kabinetu prof. Dolejška byl kromě psacího stolu také laboratorní stůl, na němž byla instalována jediná odtavená rentgenka v ústavu od fy Muller (ostatní rentgenky byly vlastní výroby). Transformátor vysokého napětí byl vedle stolu a regulační transformátor pod stolem. Debyeovou - Scherrerovou komorou byl modře smaltovaný oprýskaný kastrůlek o průměru 12 cm, který byl uprostřed dna provrtán. Do otvoru byla namontována otočná osa nesoucí dole kladku a nahoře stolek pro upevnění vzorku. Do dalšího otvoru v boku kastrůlku byla upevněna svislá štěrbina. Fotografický film zabalený do černého papíru se vkládal do kastrůlku a k vnitřní válcové ploše přitiskoval ocelovou planžetou. Hodinový strojek s kladkou a řemínkem otáčel vzorkem. Aparatura, na níž



Obrázek 7. 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).



Obrázek 8. Adéla Kochanovská-Němejcová

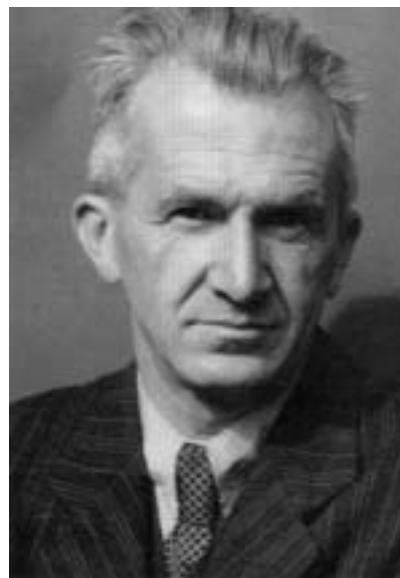
slečna doktor (Dr. A. Němejcová, provdaná Kochanovská) prováděla první snímky, byla improvizovaná, jednoduchá a spolehlivá“. (J. Bačkovský, *Vzpomínky na paní profesorku*, Pokroky MFA 32, 1987, obr. 7).

Po uzavření vysokých škol v roce 1939 se Fyzikální výzkum přemístil do smíchovské autoopravny Škodových závodů, ke konci války částečně i do Příbrami. Spolupráce se Škodovkou umožnila, že výzkum v rentgenové difrakto grafii nebyl za okupace přerušen, ale měl i dost financí na nákup zařízení a přijímání dalších pracovníků. Profesorka Adéla Kochanovská - Němejcová (1907-1985, obr. 8) se významnou měrou zasloužila o rozvoj rentgenové difrakční analýzy v ČR. Patřila mezi žáky a spolupracovníky prof. V. Dolejška. V r. 1944, kdy byl prof. V. Dolejšek zatčen gestapem, se stala prof. A. Kochanovská vedoucí oddělení rentgenové mikrostrukturní analýzy Fyzikálního výzkumu. Snaha, aby i přes uzavření vysokých škol nebyla přerušena výchova československé inte-

ligence v moderních fyzikálních disciplínách, vedla A. Kochanovskou k sepsání knihy *Zkoušení jemné struktury materiálu rentgenovými paprsky* (vydaná v letech 1943 a 1946) a skript *Radiokrystalografie*, která se stala první vysokoškolskou učebnicí tohoto oboru u nás. Spolu se svými kolegy řešila výzkumné úkoly pro průmyslové závody a lékařské kliniky a podílela se na školení rentgenových odborníků. Za výsledky dosažené při studiu romboedrické modifikace grafitu a za vypracování rtg metody stanovení velikosti částic $10^{-2} - 10^{-4}$ cm ji byla udělena v roce 1952 cena ČSAV. Na Žádost Škodových závodů hledala v r. 1936 příčinu praskání obalů pancéřových granátů. Protože se jednalo o vojenskou techniku, nemohly být výsledky publikovány. Práce prováděné na Žádost průmyslu však nevedly jen ke zdokonalení technologických procesů. Podněty z výroby byly pro A. Kochanovskou zdrojem, jehož dovedla využít k získání nových poznatků přispívajících k rozvoji strukturní rentgenografie i celé experimentální fyziky. Na její podnět vznikly v dubnu 1954 "Rozhovory o otázkách v mikrorentgenu". Těchto jednodenních seminářů se zúčastňovali členové fyzikálních pracovišť ČSAV, vysokoškolští pracovníci i pracovníci z průmyslových výzkumných ústavů. Obsahem seminářů byly přednášky z teorie i praxe rtg difrakčních metod, pozornost byla věnována i novinkám v literatuře a praktickým zařízením vyráběným u nás. Úzký kontakt pracovníků s výrobcí pomáhal rozvoji nových, a zdokonalování stávajících zařízení pro rentgenovou strukturní analýzu. Žádná žena u nás nebyla v experimentální fyzice tak úspěšná jako ona. Její spolupracovníci si jí vážili nejen pro její odborné znalosti, ale i pro to, že „neplývala slovy, nezvyšovala hlas, neměla ve zvyku kázat nebo poučovat. Byla mimořádně tolerantní a své spolupracovníky uznávala jako individuality. Pod jejím vlivem člověk nabýval sebedůvěry.“ (J. Drahokoupil, Pokroky MFA 32, 1987)

Mezi osobnosti, které přispěly k rozvoji československé krystalografie patří i fyzikální chemik Jan Böhmm (1895 -1952). Z otceva rozhodnutí chodil do německých škol a to jak v rodných Českých Budějovicích, tak po maturitě v Praze. Po 1. světové válce působil až do roku 1926 v berlínském Ústavu císaře Viléma. První vědeckou prací, kterou zde dokončil, byl výzkum vazby vody v zeolitech. Práce byla pro svou vysokou úroveň přijata jako doktorská. Jako vedoucí Haberovy rentgenografické laboratoře se Dr. J. Böhmm zabýval určováním struktury hydroxidů železa a hliníku a na jeho počest byl $\gamma - \text{AlO}(\text{OH})$ pojmenován böhmmit. Počátkem dvacátých let poznal Dr. K. Weissenberga a realizoval jeho myšlenku určení struktury metodou otáčeného krystalu. Zkonstruoval goniometr, později nazvaný Weissenberg - Böhmmův (mechanik E. Lutz), jehož popis s ilustrativním příkladem použít publikoval v Z. Phys. 39 (1926) 557.

K. Weissenberg napsal J. Böhmmovi dopis, dokládající jeho zájem o praktické provedení goniometru. V létě 1926 odjel dr. J. Böhmm do Kodaně, aby společně s prof. G. Havesym proměřil rentgenová spektra některých prvků. Po skončení experimentů se vrátil do Freiburgu, kde se v r. 1931 habilitoval a získal zde i profesuru. Jako přesvědčený demokrat měl v nacistickém Německu stále obtížnější pozici. Prof. Havesy zaslal proto prof. J. Heyrovskému dopis, v němž ho žádal, aby Böhmmovi pomohl získat



Obrázek 9. Jan Böhmm

vysokoškolské místo v Praze. J. Heyrovský spolu s V. Dolejškem intervenovali u čs. vlády a tak byl od 1. 10. 1935 J. Böhmm jako československý státní občan jmenován profesorem fyzikální chemie na pražské německé univerzitě. I zde mu nacističtí kolegové znepríjemňovali život za pasivitu v politickém dění. Po uzavření českých vysokých škol se postaral, aby prof. Heyrovský mohl pokračovat ve vědecké práci ve své laboratoři Fyzikálně chemického ústavu Karlovy univerzity. Prof. J. Heyrovský, který byl po osvobození obviněn z kolaborace s Němci, obvinění vyvrátil a zasadil se rovněž o propuštění prof. J. Böhmm z internace. J. Böhmm pak pracoval v Chemických závodech v Rybitví.

Dr. Petr Skulari (1892-1969) připravil během války monografii *Rentgenografie kovů a slitin* (1947) věnovanou aplikaci rentgenových difrakčních metod v metalurgii. Jsou v ní zahrnuty technicky dokonalé a mimořádně instruktivní rentgenogramy válcovaných kovů a slitin. První v ČR zveřejnil (Vojenské technické zprávy č.7, 1937, 156) rentgenograficky naměřené mechanické napětí vzorků kovového hliníku a tepelně zpracovaného železa a oceli. O dva roky později popsal své zkušenosti z rentgenografického určování zbytkových napětí ve svarech (Strojnický obzor č. 12, 1939, 192, č.14, 1939, 232). Dr. P. Skulari měl široké znalosti z fyziky kovů, metalurgie, metalografie i strojírenství. Díky nim byl schopen získat užitečné a spolehlivé informace jen na základě vizuálního posouzení rentgenogramů. Počátkem druhé poloviny padesátých let byl Dr. P. Skulari vedoucím skupiny rentgenové strukturní analýzy ve Výzkumném ústavu kovů v Panenských Břežanech. Jeden z členů této skupiny, Dr. K. Toman, se stal prvním českým autorem publikace o vyřešení struktury (The structure of NiSi, Acta Cryst. 4, 1951, 462).

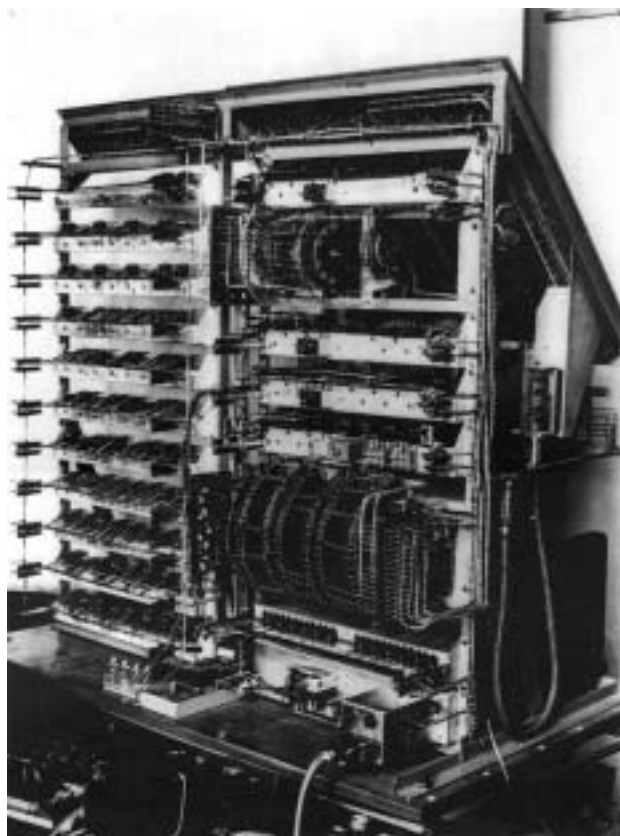
Mezi české pracovníky v krystalografii, kteří by měli být připomenuti, patří i Dr. Vladimír Vand (1911-1968) a Dr. Alan Líněk (1925-1984). V. Vand se narodil v Sumě českým rodičům, kteří se po Říjnové revoluci vrátili zpět do Prahy. Po absolvování Přírodovědecké fakulty UK byl odveden, ale v roce 1938 utekl z okupovaného Česko-



Obrázek 10. Alan Líněk

slovenska do Anglie. U firmy Lever Brothers and Unilever Ltd se začal zabývat krystalografií a reologií. Pokračoval také v astronomické aktivitě a stal se členem Královské astronomické společnosti. V roce 1946 navštívil rodiče v Praze, ale vrátil se zpět do Anglie. V r. 1950 se na Univerzitě v Glasgowě zabýval krystalografií organických sloučenin, při kterých využíval svých zkušeností pro řešení struktur. V r. 1953 odjel na Pensylvánskou universitu a v r. 1961 zde byl jmenován profesorem krystalografie. Podílel se na založení Groth Institute for the Classification of Information in Crystallography. Po odchodu Dr.V. Vanda do Anglie po něm zůstalo ve Fyzikálním výzkumu Škodových závodů základní experimentální zařízení: Weissenberg - Böhmvův goniometr a Debye - Scherrerova komůrka, na kterých začal pracovat jako diplomant Alan Líněk. (Obr. 10)

Zaměřil se na řešení struktury piezoelektrického vlnu ethylen-di-aminu a na souvislost uspořádání atomů s jeho piezoelektrickými vlastnostmi. Protože mu chybělo výpočetní zařízení, spojil se s kolektivem pracovníků z Laboratoře matematických strojů. Na základě Línkovy specifikace byly vyrobeny dva matematické stroje, z nichž každý měl sloužit k zvládnutí části strukturně-krystalografických výpočtů. Ještě před dodáním těchto strojů se podařilo A. Línkovi navrhnout, po domácku sestavit a uvést do chodu malý, jednoúčelový reléový stroj pro výpočet strukturních faktorů. Stroj byl nazván ELIŠKA (E-ENIAC-první americký elektronkový počítač obrovitých rozměrů, LI-Líněk, ŠKA-Škarda). Sloužil několik let a byl to první do provozu uvedený počítač, postavený v Československu. Byl hotov o něco dříve než univerzální počítač SAPO. Nyní je součástí sbírek Národního technického muzea a je dosud schopný provozu. Špičkovou úroveň měl i Weissenberg - Böhmvův goniometr, upravený dle připomínek A. Línka a jeho spolupracovníků a vyrobený ve Vývojových dílnách ČSAV. V roce 1958 byl vystaven na světové výstavě v Bruselu a s ním i model struktury vlnu ethylen-di-aminu, za jejíž vyřešení se dr. A. Línkovi dostalo mezinárodního uznání. V letech 1959-1960 byl v ČSAV uveden do chodu první elektronický samočinný počítač URAL I. To pro pracovníky v rentgenové strukturní analýze znamenalo začátek nového období, kdy se počítač stal nedílnou součástí řešení jejich vědeckých problémů.



Obrázek 11. ELIŠKA

Jednota československých matematiků a fyziků byla organizátorkou první mezinárodní konference o využití rentgenových paprsků v kovoprůmyslu, která se konala v poválečném Československu (28.11.-1.12.1945). Dr. P. Skulari přednesl výsledky úspěšné spolupráce technologů a rentgenových odborníků, která vedla ke korekci a úpravě výrobních postupů pro přípravu nejrůznějších kovových materiálů. 200 účastníků z ciziny tak znovu navázalo válkou přerušené vědecké i přátelské kontakty s československými vědci. Mezi těmi, kdo nepřežili fašistický teror byli i prof.V. Dolejšek, prof. F. Ulrich, prof. F. Závíška a prof. A. Šimek.

České výrobky po rentgenovou difrakci

Na prospektu továrny na rtg přístroje META Ing. Miroslava Vinopala (Obr. 12) jsou inzerovány "stroje všech výkonů pro diagnostiku, terapii i zkoušení materiálů". Po znárodnění přešla výroba rtg přístrojů, lamp a difrakčních komůrek pod n.p. Chirana. Velký význam pro mnohstranné rozšíření a využití rentgenových difrakčních metod mělo zahájení výroby přístrojů Mikrometa v n.p. Chirana. Kvalita a spolehlivost rentgenových zdrojů Mikrometa, původní vyřešení centrování rentgenek a upevnění difrakčních komůrek přímo na kryt rentgenky vedlo k urychlení strukturních analýz.

Jedním z pracovníků, kteří úzce spolupracovali s Chiranou na vývoji a výrobě rtg přístrojů byl Dr. František Khol (1915-199, obr. 13) – iniciátor výroby čs. rentgenek a rtg přístroje Mikrometa. Po studiu matematiky a fyziky na

Na 200 röntgenovacích přístrojů

»META«

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

Stavím stroje všech výkonů
pro diagnostiku, terapii
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.

Obrázek 12.

Přírodovědecké fakultě UK v Praze a po uzavření vysokých škol, učil v Čachovicích u Mladé Boleslavi a v Přerově. V r. 1942 přešel do Fyzikálního výzkumu Škodových závoů, kde spolupracoval s Dr. A. Kochanovskou. V r. 1950 nastoupil do nově zřízeného Výzkumného ústavu materiálu a technologie a v r. 1966 přešel do Ústavu radiotechniky a elektrotechniky. V oddělení mikroelektroniky, kde se řešila problematika tenkých vrstev a mikroelektronických obvodů, vybudoval rentgenovou laboratoř a zaměřil se na vypracování



Obrázek 13. František Khol

metodiky pro přesné stanovení mřížkových parametrů monokrystalických polovodičových materiálů.

Stručná historie Krystalografické společnosti

V r. 1919 byla v Bruselu založena Mezinárodní rada badatelská (International Research Council, IRC) s cílem obnovit a koordinovat mezinárodní činnost v různých oblastech přírodních a exaktních věd a jejich aplikací. V jejím rámci pak byly zakládány oborové mezinárodní unie, zaměřené na podporu a rozvoj mezinárodní spolupráce v konkrétních vědních oborech. Reorganizací Mezinárodní rady badatelské vznikla v roce 1931 Mezinárodní rada vědeckých unií (International Council of Scientific Unions, ICSU). Jednotlivé země se mohly k IRC-ICSU přihlásit protřednictvím své národní akademie či národní badatelské rady. ČSR se stala členem IRC v roce 1925 prostřednictvím Československé rady badatelské, založené za tím účelem v roce 1924. Návrh na vytvoření Mezinárodní krystalografické unie vzešel z mezinárodního shromáždění krystalografů v Londýně v červenci 1946. Mezinárodní krystalografická unie (International Union of Crystallography, IUCr) byla formálně uznána Mezinárodní radou vědeckých unií 7.4.1947. První generální shromáždění IUCr (zároveň mezinárodní kongres) se konalo 29.-30.7.1948 na Harvardské universitě v Cambridge, USA. Československá národní rada badatelská (ČS NRB) byla informována o vzniku IUCr, jí zamýšlených aktivitách a o podmínkách vstupu jednotlivých zemí sekretářem IUCr R.C. Ewanssem. ČS NRB se připojila k IUCr protřednictvím geologicko-mineralogického odboru. Organizačním stykem s IUCr byl pověřen prof. Jiří Novák - ředitel Mineralogického ústavu Přírodovědecké fakulty UK v Praze. Na aktivní spolupráci s IUCr se podílel i prof. František Slavík, který spolupracoval s komisí pro krystalografická data. V r. 1959 přešla Odborná skupina pro Studium struktury materiálů ionizačním zářením (SSMIZ) pod patronaci Československé vědecko-technické společnosti. Čs. národní komitét pro krystalografii byl ustanoven 19.4.1989 na 17. zasedání presidia ČSAV jako reprezentativní orgán ČSAV v Mezinárodní krystalografické unii (IUCr). Vědecká rada Odborné skupiny SSMIZ se na svém zasedání v srpnu 1990 rozhodla organizovat svou další činnost formou samostatné vědecké společnosti. 6.2.1991 byla založena Krystalografická společnost a byla přijata do svazku vědeckých společností ČSAV na 6. zasedání presidia ČSAV 20.2.1991. Cechovní právo - žezlo Krystalografické společnosti bylo prezentováno nezávislou komisí ve složení: Doc. T. Havlík, Dr. F. Eichler a Ing.M. Petrák na kolokviu ve Vojtěchově v květnu 1992. žezlo tvoří rentgenové lampa ozdobená krystaly. Znak Krystalografické společnosti, který navrhl Dr. V. Zikmund v roce 1983 byl již mnohokrát využit v původní i pozměněné podobě. Pod patronací Krystalografické společnosti jsou organizovány nejen tradiční jednodenní Rozhovory o aktuálních otázkách v rentgenové a neutronové difrakční analýze, ale i kolokvia, konference s mezinárodní účastí a přehlídky prací mladých krystalografů. Je vydáván časopis Materials structure in chemistry, biology, physics and technology.



Literatura

1. J. Bačkovský: *Bulletin KS*, březen 1993
2. J. Chojnacki: *Základy chemické a fyzikální krystalografie*, Academia Praha 1979
3. J.Janko, E. Těšínská: 100 let objevu kapalných krystalů *Čs.čas.fyz.* A39 (1989) 72.
4. I. Kraus: *Věda v Československu 1945–1960*. Sborník, ed. L. Nový 1982.
5. I. Kraus: *Bulletin KS* 1990.
6. I. Kraus: *Bulletin KS* březen 1993.
7. A. Línek, C. Novák: *Věda v Československu 1945–1960*. Sborník, ed. L. Nový, 1982.
8. V. Rosická: *Bulletin KS* Jaro 1991

Autorkou fotografií z výstavy je Z. Mlýnková

Příloha - vybrané panely výstavy

Difrakce rentgenových paprsků a její využití v praxi

Princip difrakce rentgenových paprsků

Dopadá-li rentgenové (nebo obdobné) záření na jakoukoliv látku, dochází k jeho rozptylu. Je-li tato látka krystalická a je-li splněna tzv. difrakční podmínka, dochází k interferenci tohoto záření, tj. k difrakci. Nejjednodušším vyjádřením difrakční podmínky je Braggova rovnice

$$\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta_{hkl}$$

λ je vlnová délka použitého záření (0.06–0.23 nm pro rtg difrakční analýzu), hkl jsou symboly atomových rovin, které je možno proložit krystalem, d_{hkl} je vzdálenost mezi rovinami (hkl), θ_{hkl} je úhel, pod kterým záření difraktuje na rovinách (hkl). Difraktované záření je možno registrovat a je experimentálním základem dalšího využití difrakce.

Pohádka o rentgenové fázové analýze, aneb jak získat půl království.

Byl jednou jeden Král a ten měl prosperující království a moc hezkou dceru. Jednoho dne si nechal zavolat Honzu a řekl mu: „Milý Honzo, zjistíš-li mi do zítřka, obsahuje-li tato směs zlato, dostaneš za ženu princeznu a půl království.“ Mladý krystalograf nelenil a zhotovil difrakční záznam neznámého prášku. Odečetl polohy píků, spočítal mezirovinné vzdálenosti a pomocí zázračné identifikační kartotéky sloučenin a prvků určil neznámé sloučeniny ve směsi. Zlato nenašel. Ráno oznámil výsledek Králi a byla svatba. Honza dále pracoval v rtg laboratoři. Část daní poddaných byla použita na nákup rentgenových lamp a počítačových programů. Princezna pomáhala Honzovi připravovat vzorky, občas v laboratoři uklidila a dobře se jim vedlo.



Obrázek 14.

Rentgenová difrakce v lékařské praxi a biologii

Lidské tělo je složitý organismus, který vytváří látky, k jejichž zkoumání je vhodná rentgenová difrakční analýza. Pevné látky (konkrementy), vznikající za určitých podmínek v některých orgánech lidského těla, jsou důsledkem změn v organismu a objevují se např. v močových nebo žlučových cestách nebo ve slinné žláze. Pevné látky, dodávané lidskému organismu zvenčí na něj mohou mít vliv jak pozitivní (léky) tak negativní (jedy, drogy). Příčinou vzniku močových kamenů mohou být např. metabolické poruchy v organismu, zvýšená sekrece uroproteinů i vnější vliv životního prostředí. Biomineralizační pochody v organismu nejsou dosud uspokojivě vysvětleny. Pro



Obrázek 15.

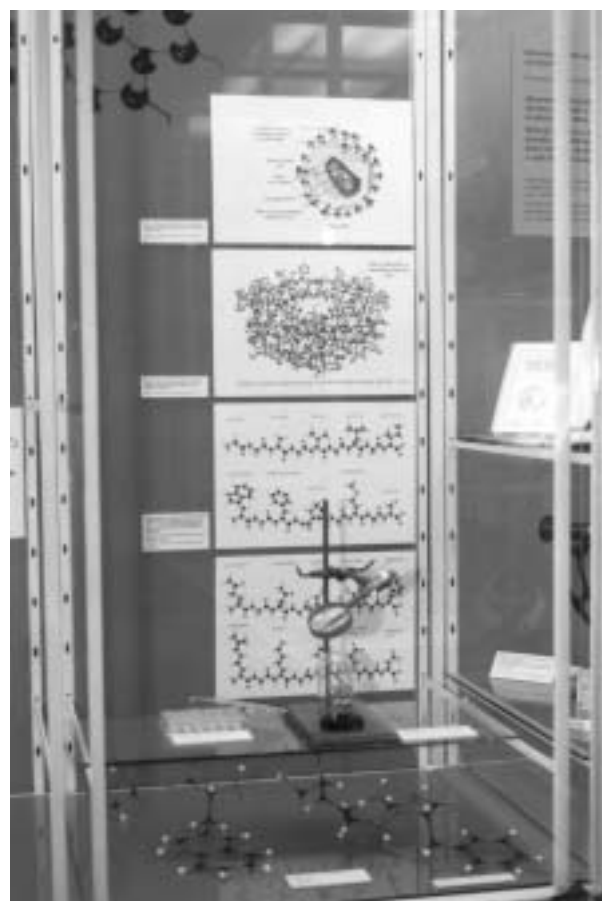
neoperační způsoby odstranění močových kamenů je třeba znát jejich složení co nejpřesněji. Rentgenová difrakční analýza močových kamenů slouží k rychlému a spolehlivému určení jejich jednotlivých složek - pojivové části (tvořené převážně bílkovinami) a části, pro močový kámen charakteristické. Snaha objasnit zákonitosti mechanismu vzniku a růstu žlučových kamenů se dostává do popředí pozornosti lékařů v souvislosti se způsoby jejich odstraňování a prevencí vzniku. žluč přesycená cholesterolem precipituje, cholesterolové deriváty krystalizují a vznikají cholesterolové kameny. Cizí látky ve žluči nebo změněný poměr složek žluči vede ke vzniku bilirubinátových nebo kalciumrubinátových kamenů. V jistých případech vznikají i kalciumkarbonátové kameny. žlučové kameny jsou heterogenní, lze u nich rozeznat nehomogenní jádro a následný růst homogenních vrstev, nebo vrstev tvořených radiálně uspořádanými krystalky. Jak kameny ve žlučníku, tak i kameny ze žlučovodu jsou směsí organických látek, anizotropních lipidů, derivátů cholesterolu, derivátů kyseliny cholové, vápenatých solí bilirubinu a mastných kyselin. Z anorganických látek jsou často přítomny uhličitán vápenatý (v modifikaci vateritu, aragonitu, kalcitu a apatitu) a hydroxyfosforečnan vápenatý dihydrát –brushit. Ojedinelý je výskyt jednofázových kamenů tvořených cholesterolem nebo uhličitánem vápenatým. Pro dokumentaci větší informační hodnoty rentgenové difrakční analýzy ve srovnání s jinými fyzikálně - chemickými metodami byly uvedeny výsledky analýz získané rentgenovou difrakcí, plynovou chromatografií a z měření infračervených spekter. Rentgenovou difrakční fázovou analýzou lze určit i čistotu a složení drog a zjistit tak cestu drogy od překupníků až k místu jejího původu. (*Přírodovědecká fakulta UP, Olomouc*).

Výzkum nových léků a kontrola jejich kvality

Podstatou každého léku je tzv. aktivní substance – chemická sloučenina, vyráběná buď mnohastupňovou chemickou syntézou, nebo extrahovaná z přírodních látek. Protože léčebný efekt sloučeniny je ovlivněn tvarem molekul léčebné složky, je cílem rentgenových studií získání informací o tvaru molekul, v daném případě námelových alkaloidů a cyklosporinu A. Malý krystalek této látky umístěný na rentgenový čtyřkruhový difraktometr, několikadenní měření, speciální výpočetní programy a jejich náročné vyhodnocení umožňují určit strukturu a složení aktivní substance, které ovlivňují její léčivé účinky. Uvedení nového léku je dlouhý a nákladný proces, který zahrnuje základní výzkum, přípravu, farmakologické a toxické studium a klinické testy. V průměru uplyne 10 let od okamžiku, kdy byla vybrána molekula vhodné látky pro podrobné studium a testování. Z přibližně 10 000 testovaných chemických sloučenin pouze jedna je uvedena na trh. Úspěšná spolupráce týmu krystalografů VŠCHT a vývojových pracovníků z opavské Galeny a.s. se týká mimo jiné i léčiv z námelových alkaloidů (léčba migrény, Parkinsonovy nemoci, stařeckých chorob) a cyklosporinu A (léková forma Consupren) k potlačení imunitní reakce organismu při transplantacích a k léčbě autoimunitních nemocí. Rentgenová difrakce má důležitou úlohu ve farmaceutickém výzkumu při kontrole a výrobě léčiv a krystalografové



Obrázek 16.



Obrázek 17.



dostávají ke studiu velice zajímavý materiál. (*Vysoká škola chemicko-technologická, Praha, Galena a.s., Opava*).

Pracovníci laboratoří Ústavu makromolekulární chemie, Ústavu molekulární genetiky a Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR spolupracují při navrhování a studiu struktur léčiv proti virovému onemocnění AIDS. Životní funkce organismu jsou založeny na velké variabilitě makromolekul. V případě viru, který způsobuje nemoc AIDS (syndrom získaného selhání imunity) je cílem nalézt léčivo, jehož molekula zamezí funkci části viru (HIV –1 proteázy). Proteáza vytváří uvnitř viru strukturu, bez které se virus není schopen dále množit. Proteáza je tvořena dvěma makromolekulami. Nejlepší léčivo je to, které zapadne přesně do zářezu mezi oběma makromolekulami. Vazbou léčiva na HIV proteázu tak dojde k zamezení dalšího rozmnožování viru HIV (Human Immunodeficiency Virus). Rentgenová strukturní analýza slouží k pochopení funkce makromolekul, což je velmi důležité pro vývoj léčiv. Přibližně platí, že nejlepší lék je ten, jehož molekula zapadne do vhodného vazebného místa v makromolekule a tím podpoří, nebo naopak zamezí její biologickou činnost. Pro určení podrobné struktury léčiva nebo proteázy je nutné získat jejich krystaly. Krystaly se pěstují v malých kapičkách a k rentgenové strukturní analýze postačí krystalek o váze 0.000 000 1 g.

(*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha*).

Rentgenová difrakce v mineralogii

Mineralogie – od morfologie krystalů k jejich vnitřní struktuře: Vnější morfologie krystalů je i v terénu snadno rozpoznatelná a často charakteristická pro určité nerosty. Mineralogie zkoumá chemické složení, krystalovou strukturu, fyzikální vlastnosti a vznik přírodních krystalických látek-minerálů. Minerál (nerost) je stejnorodá sloučenina nebo prvek, obvykle krystalická, vzniklá přírodními procesy na Zemi nebo ve vesmíru. V současné době známe v naší sluneční soustavě 3800 nerostných druhů. Rentgenová difrakční fázová analýza odpovídá v mineralogii na dvě základní otázky - *jaké minerály* jsou ve zkoumaném vzorku a v *jakém množství* jsou ve vzorku zastoupeny. Mezinárodní centrum pro prášková data každoročně obnovuje a doplňuje databázi práškových rentgenografických dat. Databáze obsahuje data rentgenových difrakčních záznamů více než 60 000 sloučenin a slouží k identifikaci zkoumaných látek. Rentgenovou fázovou analýzou byla v roztroušených úlomcích meteorického železa v okolí Meteor Crateru potvrzena přítomnost vysokotlakých fází SiO₂ (coesitu a stišovitu). To podpořilo myšlenku vzniku tohoto kráteru dopadem části železného meteoritu Canyon Diabolo, který před 49 000 lety explodoval při dopadu na pláně Arizony a vytvořil Meteor Crater o průměru 1.2 km a hloubce 180m.

(*Český geologický ústav*)



Obrázek 18.



Obrázek 19.

Precesní metoda

Precesní komora slouží k filmové registraci difrakce Röntgenova záření na monokrystalech povahy anorganické, minerální či organické. Precesní difrakční metoda byla vyvinuta v USA v roce 1944 M.J. Buergerem a během padesátých a šedesátých let se rychle rozšířila. S novým mechanickým řešením komory přišli F. Hanic, J. Maďar a V. Kiss v roce 1955. Rozšíření precesní metody do takzvané zpětně - reflexní oblasti nese datum roku 1980. V dnešní době mají precesní komory sice omezenější použití nežli před několika desetiletími, ale jsou stále užitečné pro rychlé získávání prvních informací o zkoumaném krystalu. Precesní snímky vycloněných sítí představují jejich geometricky věrné zobrazení a jsou proto ideální při určování souměrnosti krystalu, zejména při přiřazování krystalu k jedné z 230 prostorových grup, rozdělených nerovnoměrně do sedmi krystalových soustav. Precesní snímky jsou též užitečné při studiu dvojčatění či orientovaných srůstů krystalických fází při výzkumu polytypických struktur. Univerzálnost tohoto přístroje učinila z precesní komory nepostradatelného pomocníka téměř ve všech světových krystalografických laboratořích. Snímky krystalu crossitu (amfibol) z precesní komory pořízené technikou „cone axis“ dovolují určit rozměry základní buňky a její úhly.

(Ústav geochemie, mineralogie a nerostných zdrojů PŘF UK, Praha).



Obrázek 20.

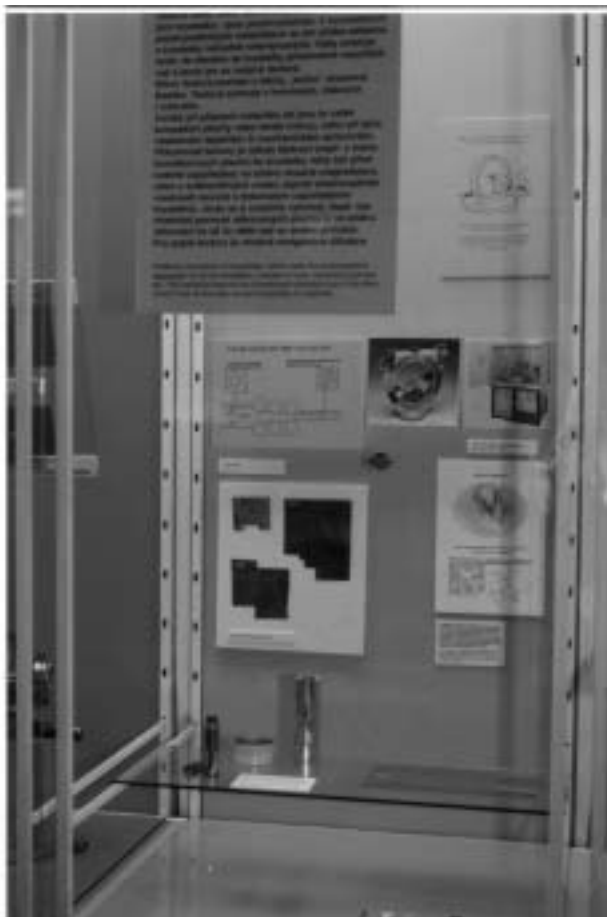
Laueho metoda

První rentgenová difrakční metoda, nejstarší, nejjednodušší a stále užívaná byla nazvána po Maxi von Laue, který tento experiment provedl jako první. Nápad a uskutečnění pokusu je popsán v článku A. Kochanovské (Pokroky mat. fyziky a astronomie VII, 1962). V diskusi s P.P. Ewaldem napadla Laueho myšlenka nechat procházet paprsky X krystalem. Tvoří-li atomy skutečně prostorovou mřížku, musí vzniknout obdobné interferenční jevy jako světelné interference na optických mřížkách. W. Friedrich a P. Knipping se rozhodli tuto myšlenku experimentálně ověřit. Na snímku krystalu síranu měďnatého, získaného po průchodu paprsků X, byly patrné pravidelně uspořádané stopy odpovídající svazkům difraktovaným na periodicky souměrném krystalu. Myšlenka na matematickou teorii zachyceného difrakčního jevu podle tří period krystalové mřížky byla podnícena nedávno formulovanou teorií ohybu na lineární mřížce. Již před tímto pokusem nechali fyzici procházet paprsky X krystaly. Omezovali se však jen na pozorování paprsků prošlých přímo. Odchýlené - difraktované paprsky unikly jejich pozornosti. Postupem doby se z experimentální metody, kdy rentgenové paprsky difraktované krystalem necháme dopadat na film umístěný před (metoda na odraz) nebo za vzorkem (metoda na průchod), stala nejužívanější metodou pro studium symetrie krystalů. Uspořádání skvrn na filmu poskytuje informaci o vnitřní symetrii krystalu. Vhodný držák umožňuje nastavení - orientování vzorku pro fyzikální měření, která jsou závislá na orientaci krystalových os.

(Fyzikální ústav AV ČR, Praha).

Textura – přednostní orientace krystalitů

Většina látek, které nás obklopují, je tvořena z malých krystalků - jsou polykrystalické. V kompaktních polykrystalických materiálech se jen zřídka setkáme s krystalky náhodně orientovanými. Vždy existuje směr, do kterého se krystalky přednostně uspořádávají, a tento jev se nazývá textura. Slovo textura pochází z latiny, textor znamená tkadlec. Textura existuje ve vláknech, vrstvách, horninách. Vzniká při přípravě materiálu (až to jsou velké kompaktní plechy nebo tenké vrstvy), nebo při jeho následném tepelném či mechanickém zpracování. Přítomnost textury je někdy žádoucí; např. u transformátorových plechů by krystalky měly být přednostně uspořádány ve směru snadné magnetizace, nebo u světlocitlivých vrstev, jejichž elektrooptické vlastnosti souvisí s dokonalým uspořádáním krystalků. Jindy se jí snažíme vyhnout. Např. mechanická pevnost válcovaných plechů je ve směru válcování několikrát větší než ve směru příčném. Pro určení textury je vhodná rentgenová difrakce. Z celkového počtu krystalků texturovaného materiálu může být přednostně orientována jen malá část, zbytek může být orientován náhodně. Procentuální poměr orientovaných krystalků v analyzovaném objemu materiálu zjistíme proměřením intenzity difrakce roviny (hkl) při různých náklonech vzorku. Textura výchozího plechu (plastů ap.) má výrazný vliv na jeho lisovací vlastnosti. Změna textury způsobená technologií výroby ovlivní mechanické vlastnosti nábojnice.



Obrázek 21.

Dolní část musí být tvrdá a houževnatá, horní měkká. Také při výrobě žiletek je třeba znát směr válcování výchozího plechu, aby nedošlo k jejich lámání.
(VTÚO, Brno).

Měření mechanických napětí.

Rentgenografická analýza mechanických napětí pomáhá konstruktérům nalézt odpověď na otázku, jaké technologické postupy jsou z hlediska užitkových vlastností výrobků ty nevhodnější. Napětí je síla působící na jednotku plochy. Napětí je odvozená veličina. Měříme deformaci ΔL a z ní pak podle Hookova zákona vypočítáme napětí σ . Napětí klasifikujeme podle toho, existují-li napětí v tělese pouze při působící vnější síle (vložená) nebo i po jejím odstranění (zbytková). Působí-li na krystal mechanické napětí, změní se vzdálenosti mezi atomy, tvořícími krystal. Rentgenové paprsky se v deformovaném krystalu rozptylují jinak než v nedeformovaném. Známe-li, jaká zbytková napětí v tělese působí, můžeme využít jejich příznivých účinků nebo předcházet škodlivému působení. Tlaková napětí jsou zpravidla užitečná (zvyšují odolnost materiálů proti korozi), tahová napětí naopak užitkové vlastnosti zhoršují. Zbytková napětí mohou v materiálech vzniknout např. po rychlém ochlazení (kalení), při sycení povrchu kovů atomy uhlíku, dusíku (cementování, nitridování) apod., nestejnoměrnou deformací různých částí těles. Stav zbytkových napětí v povrchových vrstvách lopatek kompresorů může významně ovlivnit spolehlivost provozu



Obrázek 22.

velkých energetických zařízení.

(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha).

Krystaly – zdroj inspirace architektů.

Krása a elegance krystalů přitahují svým kouzlem nejen věštců a přírodovědce, ale staly se též inspiračním zdrojem architektů. V letech 1910 - 1925 vznikaly v Československu stavby, na nichž si všimneme nejen zvýrazněné symetrie, hry s kombinací ploch, úhlů, ale i půvabných deformací, které do nich vnášejí dynamiku, napětí a vazbu



Obrázek 23.

mezi jednotlivými prvky. Spirála, hyperbola, parabola–křivky, které vyjadřují změny funkcí a dávají uměleckým formám dynamický charakter (hojně využívané v baroku a secesi), jsou v kubismu nahrazeny lomenými tvary, které odpovídají deformačním silám v krystalu. J. Chochol (1880-1956): *“Co odmítáme z dekoru a ozdob, chceme docílit silou koncentrovaného celkového dojmu, jehož znakem bude přičuť matematické přesnosti, neuhlazené přísnosti a zrnité drsnosti”*. J. Gočár (1880-1945): Dům u Černé Matky Boží (Černá Madona – bohyně podzemí, královna rud a minerálů), J. Chochol: Rodinný dům (Rašínovo nábřeží), E. Králíček: Lampa (Jungmannovo náměstí), E. Králíček :Dům Diamant (Spálená ul.)

Hlavně pro mladé návštěvníky byl na výstavě počítač s programem zobrazujícím modely struktur vybraných látek. (ČGÚ, Praha). Uprostřed výstavní místnosti byla „stará laboratoř“, ve které byly umístěny Debye-Scherrerovy komůrky, texturní goniometr, prohlížečka filmů ap. Součástí výstavy byl i odpočinkový koutek s televizí a video filmy z prostředí současných rtg laboratoří. Na výstavě byly k dispozici letáčky v češtině a angličtině, kde se návštěvníci dověděli základní údaje o rentgenové difrakci a kde byl uveden i seznam pracovníků, kteří se podíleli na přípravě výstavy. Vystavené minerály byly zapůjčeny ze sbírek Národního muzea Dr.J. Litochlebem.

Před zahájením výstavy byla uspořádána 2.7.1998 v Národním muzeu tisková konference. Upozornění na výstavu se pak objevilo v novinách Mladá fronta Dnes, Večerník Praha, Boleslavském deníku, Hospodářských novinách a v časopise Věda, technika a my. Slavnostní vernisáž se konala 16.8.1998.

Pro vás, kteří jste se zúčastnili kongresu i výstavy snad bude zajímavé si přečíst, jak o ní psali různí reportéři

VTM 9/98

Svět viděný neviditelnými paprsky.

U příležitosti 18.Evropského setkání krystalografů v Praze pořádají Krystalografická společnost, Národní muzeum a Archiv AV ČR zajímavou výstavu s neméně zajímavým názvem: Struktura mikrosvěta – svět viděný neviditelnými paprsky. Výstava se koná v Hollareu Národního muzea v Praze až do 11. října. Opravdu stojí za připomenutí konec 19. století, dobu objevu paprsků X, později pojmenovaných po svém objeviteli W.C. Röntgenovi. Rentgenovy paprsky, elektromagnetické kmity o vlnové délce řádově 1000x kratší než viditelné světlo, jako neviditelná nit spojují fyziky, chemiky, biology a všechny ostatní profese, které se zabývají vztahem mezi vnitřní stavbou látek a jejich fyzikálními vlastnostmi. Výstava není jen pohledem do minulosti, ale i upozorněním na současný způsob “nahlížení do vnitřního světa hmoty“ pomocí neutronového a synchrotronového záření.

Mladá fronta Dnes 15.7.1998

Expozici Struktura mikrosvěta chtějí její autoři přiblížit vědní obor krystalografie.

Nové Město (hec)-Hlavnímu městu se letos dostane té pocty, že se v srpnu stane místem konání 18.evropského setkání krystalografů, tedy mezinárodního kongresu odborníků z oboru krystalografie. Při této příležitosti se Krystalografická společnost s Akademií věd ČR rozhodly požádat o spolupráci Národní muzeum a uspořádat výstavu, která by přiblížila tento zajímavý vědní obor laické veřejnosti. Výstava nazvaná Struktura mikrosvěta je v Národním muzeu k vidění do 11. října. „Lidé mají o této vědě velmi mlhavý pojem. Řekne-li se krystalografie, představí si pouze minerály. Bez výzkumů této vědy by však zeměkoule již neuživila lidstvo, neboť právě krystalografie zkoumá využití a funkci rostlin. A stejně tak by se bez krystalografických objevů neobešla ani lékařská věda a vývoj nových léčiv,“ vysvětlil Jindřich Hašek z Krystalografické společnosti. Expozice srozumitelnou cestou seznamuje diváka s podstatou vědního oboru krystalografie a prostřednictvím odborných publikací, fotografií a schematických nákresů ilustruje jeho počátky a historii. Některé modely například ukazují části virů HIV nebo Parkinsonovy choroby a způsob, jak je možné tyto viry napadnout a následně léčit choroby jimi způsobené. Část výstavy se zabývá také objevem rentgenových paprsků, který krystalografii přinesl možnosti podrobnějších výzkumů. “Rádi bychom obor krystalografie polidštili, posloužit by nám k tomu mohla právě tato výstava a také srpnová konference, jíž se mohou zúčastnit i laikové, kteří mají o obor zájem. Málokdo také ví, že tato věda má v tuzemsku dávnou tradici. Již v počátcích výzkumů rentgenových paprsků na konci devatenáctého století byli naši odborníci schopni díky vysoce kvalitnímu vybavení laboratoří přesně zopakovat experimenty svých předchůdců,“ uvedl Ivo Kraus, jeden z autorů výstavy.

Boleslavský deník 15.8.1998

Kongres krystalografů v Praze doprovází expozice.

Krystalografové, tedy vědci, zabývající se strukturou hmot, zahájí dnes v Praze své osmnácté evropské setkání. Konferenci asi 800 odborníků, která potrvá do pátku 21.srpna, organizuje Krystalografická společnost, Národní muzeum a Archiv Akademie věd ČR. Kongres doprovází v Hollareu Národního muzea výstava, která nabízí veřejnosti pohled do struktury mikrosvěta, viděného neviditelnými rentgenovými paprsky. Krystalografie vznikla jako součást popisné mineralogie a jejím cílem byl výzkum tvaru a vnitřní stavby krystalů z geometrického hlediska. V českých zemích se krystalografií zabýval v polovině 16. století Georgius Agricola v Jáchymově. Půlstoletí po něm napsal v Praze Johannes Kepler málo známou práci o krystalografii. Po objevu rentgenových paprsků v roce 1895 bylo možno zkoumat také vnitřní strukturu hmoty. Současná krystalografie umožňuje zkoumat veškerou hmotu s pravidelnou vnitřní strukturou. I když výstava doprovázející kongres neoslní nádherou exponátů, každý najde něco zajímavého. V první části expozice, která je doplněna dětskými kresbami princezen a králů ozdobených drahokamy, jsou připomenuty osobnosti evropské krystalografie. Druhá část výstavy je věnována širokému využití krystalografie ve strojírenství, při výzkumu meteoritů, výrobě nových léků a identifikaci drog. Návštěvníci si mohou prohlédnout např. model vnitřní struktury léku



Cyklosporinu užívaného k potlačení imunitních reakcí po transplantaci nebo se z různých úhlů podívat na displeji počítače na struktury řady molekul.

Večerník Praha 18.8.1998

Vidět neviděné

Praha (vač). Pohled do struktury mikrosvěta, viděného neviditelnými rentgenovými paprsky, nabízí v Hollareu Národního muzea výstava, která doprovází kongres krystalografů. Na 80 vědců zabývajících se strukturou hmot zahájilo v sobotu v Praze své osmnácté evropské setkání, které potrvá do pátku 21.srpna. Konferenci organizuje Krystalografická společnost, Národní muzeum a Archiv Akademie věd ČR. Krystalografie vznikla jako součást popisné mineralogie a jejím cílem byl výzkum tvaru a vnitřní stavby krystalů z geometrického hlediska. V českých zemích se jí zabýval v polovině 16. století Georgius Agricola a půlstoletí po něm i Johannes Kepler. Dnes se krystalografie využívá mj. ve strojírenství, při výzkumu meteoritů, výrobě nových léků a identifikaci drog.

A jaký byl ohlas návštěvníků výstavy?

Výběr z čitelných zápisů v návštěvních knihách.

Bylo to super, ale mě do toho nic není. *M.K.*

Excellent display. It's nice to know the person behind the discovery. *Colette Honk UK*

A very nice exhibit. Often the science is presented without the history. We can learn a lot more than science from scientists. *David Rickelts UK*

Bylo to velice poučné a velmi nás to zaujalo. *Chemičky z Ostravy, Romana a Lucie*

Fakt pěkný. Zajímavá byla struktura námelových alkaloidů. *Lukáš, Linda*

Bylo to tu moc hezké, nejvíc se mi líbila televize. *Monika z Olomouce*

I liked all these lovely, gorgeous scientific knick-knack. Love. *Patsy Slore*

Mám ráda Rentgena

Vaše výstava Struktura mikrosvěta mne velice zaujala. Děkuji vám. *Michaela Tapková*

Ta wystawa jest do niczego. *Dominika*

Congratulation to the nice and very didactical exhibition of the history of crystallography followed by X-ray crystal-

lography. I do like to rememeber the 40 years spent with such „česky“ instruments. *A. Kálmán*

Congratulation to the authors for this interesting and very impressive work. *P. Klimanek*

Ani nevíme, co jsme viděli. *Ondra, Božka, Jenda, Alča*

Very interesting and well presented. *J. Kloos*

I found the exhibits fascinating and very informative - very well done. *M. Poherty, Australia*

I don't really understand microworld, but it must be interesting.

Pěkná blbost, velmi nezáživné jako celá fyzika. *DDD*

Vůbec se mi to nelíbí. *Janáková, Pelhřimov*

Prekrasnaja část vystavki. Osobeno pro X-ray diffraction of cocaine. *Černogolovka*

Milí fyzici, matematici a jiní podobně nadaní. Máte můj neskonaleý obdiv a nedejte se odradit. *podpis nečitelný*

Celkem to šlo. *Rýz*

Nice job. *From a USA geologist. Rick*

Kdybych se byl býval lépe učil fyziku snad bych i lépe rozuměl, ale i tak mě uchvátily přístroje a počítačové struktury. *Tomáš B. Novák*

Ten počítač je perfektní. *Eliška*

Je to super, hlavně ten počítač. *M.*

Bylo to skvělé a hodně se mi to hodilo k učivu. Ahoj. *Míša Červinková*

Velmi zajímavá výstava, která pomůže přiblížit problematiku člověku, který o ní mnoho neví a to málo, co se naučil ve škole, už dávno zapomněl. Velmi užitečné. Děkuji. *Jitka*

Báječné, zvláště Pohádka o fázové analýze je boží. *J. Kopeček. P.S. Tak statečné vystoupení před veřejností.*

Bylo to tu pěkné na to že je mi 9 let tak tomu rozumím *Martina Morávková, Jičín*

Zajímavé geometrické obrazce, ale chemii nerozumím. *Čechová*

Velice poučné. Děkuji. *D...*