

- na požiadanie Výkonného výboru IUCr som vypracoval kapitolu "Layer stacking in general polytypic structures" pre Vol.C Medzinárodných kryštalografických tabuliek.
- usporiadali sme tri trojdňové semináre "Kryštalografia a kryštalochémia silikátov" v Stupave,
- Laboratórium bolo koordinátorom viacročnej práce na československom kryštalografickom názvosloví, do ktorej sa zapojili viacerí účastníci Rozhovorov. Pretože išlo o náročnú a nevďačnú prácu (názvoslovie každý používa ale takmer nikto necituje), uvádzam tu s vďakou a menovite, autorov všetkých kapitol, ktoré sme stihli spracovať a vďaka iniciatíve Zdeňka Weissa aj vydať v rámci Bulletinov našej spoločnosti: Boris Gruber, Slavomil Ďurovič, Pavel Fejdi, Lubor Žák, Ivan Červeň, Václav Valvoda, Jaroslav Fiala, Lubomír Smrček, Josef Kuběna, Viera Trnovcová, Václav Holý, Dušan Korytár, Jindřich Hašek, František Pavelčík, Marián Čerňanský, Ivo Kraus, Jiří Ječný a Ján Maďar.

Po roku 1990 sa Ľubo Smrček vrátil do našej pracovnej skupiny. Bol totiž z Laboratória "odídený", pretože preňho "nebolo miesto" a je kuriózne, že vedenie Laboratória mu ešte predtým prácu s monokryštálmi výslovne zakázalo. Odišiel našťastie iba do susedného laboratória nášho ústavu. Ľubo, ktorý sa medzičasom intenzívne venoval práškovej difrakcii, si rýchlo osvojil aj potrebné vedomosti z monokryštálovej štruktúrnej analýzy, oprášili

sme kryštály cronstedtitu a v spolupráci s Vaškom Petříčkom, Jirkom Hyblerom a Zdeňkom Weissom sme pokračovali v ich štúdiu. Cronstedtit zaujal aj Toshihira Kogureho (Tokio), špecialistu v odbore vysokorozlišovacej transmisnej elektrónovej mikroskopie (HRTEM), pre jeho dobrú odolnosť voči elektrónovým lúčom, čím sme získali ďalší pohľad na tento skutočne modelový minerál pre štúdium polytypizmu. Na svete sú už prvé výsledky aj publikácie. Aj spolupráca s Milanom Riederom na štruktúrnych štúdiách slúd už priniesla prvé výsledky.

Ľubo sa postupom času viac sústredil jednak na kvantovochemické analýzy fylosilikátov, ale najmä na teóriu rietveldovského spresňovania, kde si vybudoval aj solidnú medzinárodnú prestíž svojimi teoretickými analýzami, ktorými uvádzal dosť rozšírené rozprávkové možnosti tejto metódy na pravú mieru. Súčasne sa intenzívne venuje alternatívnej metóde riešenia (organických) štruktúr a interkalátov z práškov pomocou ich modelovania na základe minimalizácie potenciálnej energie a experimentálnou verifikáciou navrhnutých modelov pomocou Rietveldovej metódy. Jeho pričinením máme dnes na ústave práškový difraktometer STOE. Ľubo sa stal spoluorganizátorom pravidelných každoročných Regionálnych konferencií o práškovej difrakcii (RPDK), z ktorých desiatka bude v tomto roku v Liptovskom Mikuláši.

## ÚTRŽKY Z HISTORIE RENTGENOVÉ LABORATOŘE NA KATEDŘE ANORGANICKEJ CHÉMIE PŘÍRODOVĚDECKÉ FAKULTY UNIVERSITY KARLOVY V PRAZE

### I. Císařová

*Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Albertov 6, 128 43 Praha 2*

Je zřejmé, že na rozdíl od mnohých jiných věcí, pracoviště je tím váženější, čím je starší. A tak jsme podnikli hluboký výzkum počátků Rentgenovy metody na Albertově. Bohužel rozsáhlé, dosud neobjevené práce Cimrmanovy v této oblasti, zůstaly neobjeveny i nadále, dochovala se pouze jeho fotografie, na níž spolu s Františkem Josefem I., jistě ne náhodou, otevírají budovu nynějších chemických kateder právě deset let po objevu paprsků X.

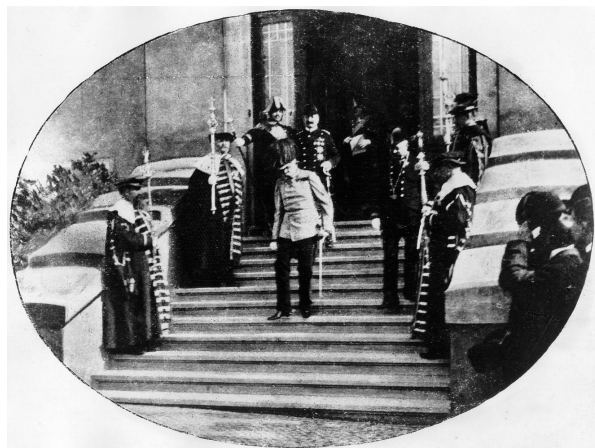
Járu Cimrmana je vidět v pozadí za mocnářem ve dveřích budovy. O předmětu, který drží v ruce, se vedou spory, převažujícím názorem je, že se jedná o první prototyp Cimrmanovy kyvadlové rtg. lampy, z níž se dochoval pouze držák, který zůstal nepochopen a byl později patentován jako metronom.

Slibný začátek přerušila světová válka, a tak dokumentované rentgenové experimenty do budovy chemických kateder přicházejí až poté, co nacismus vyštval z Německa koncem třicátých let českobudějovického rodáka Jana Böhma. Profesor Böhm pracoval v oblasti rentgenové difrakce a spektrografie již od konce první světové války. Spolupracoval s K. Weissenbergem na konstrukci rentgenového goniometru a vybudoval rentgenovou laboratoř ve Freibergu. S jeho příchodem na Fyzikálně-chemický ústav pražské německé university jsou pak spojovány první experimenty používající rtg. záření.

Z té doby se bohužel také nic nedochovalo, rentgenový přístroj Siemens s Debyeovými-Scherrerovými komůr-

kami předválečné výroby byl zrušen v důsledku neočekávané návštěvy hygienika v roce 1959.

Tím přišla laboratoř o jediný experimentální přístroj a je zásluhou profesora Josefa Louba, že to nebyl konec i celé laboratoře, nýbrž že se zde naopak obor rtg. difrakce dále rozvíjel.



Panovník odchází z českého chemického ústavu Na Slupi vyprovázen geniem české vědy J. Cimrmanem



Již tři roky po hygienické katastrofě je pracoviště vybaveno dvěma rtg. přístroji s komůrkami pro snímkování prášků a Weissenbergovým goniometrem. V témže roce začala spolupráce s Ústavem fyziky pevných látek, zejména s dr. Alanem Línkem a ing. Ctiradem Novákem. Díky ní získala laboratoř nejen další rentgenový zdroj s Weissenbergovým goniometrem z přebytků ÚFPL, avšak především místo, kam je možné se obrátit o radu, jak je tomu ostatně dodnes. Od roku 1962 byla na katedře zavedena rentgenostrukturní analýza jako obor výzkumu. První upřesněná struktura hexabromotelluricitanu draselného pak byla prezentována v roce 1964 na konferenci v Bratislavě.

Roku 1965 se rentgenová krystalochemie začala přednášet jako jednosemestrová přednáška a několik úloh se stalo součástí kursu pokročilých praktik.

Vývoj pracoviště lze dokumentovat následujícími čísly: Od roku 1962-1985 bylo zhotoveno 13800 snímků nebo difraktogramů práškových vzorků a vyřešeno 26 struktur monokrystalů a to především pomocí měření na spřátelených 4-kruhových difraktometrech ve Fyzikálním ústavu a Ústavu makromolekulární chemie. V té době se na katedře strukturní analýze věnovali tři vědečtí pracovníci, kromě dr. Louba i dr. Podlahová a dr. Kratochvíl a jedna laborantka, paní Pitterová. V oboru byla vyškolená řada diplomantů, publikační činnost se zaměřovala především na oblast strukturní analýzy monokrystalů.

Tento stav trval v podstatě až do počátku devadesátých let, kdy se zásadním způsobem změnilo experimentální vybavení laboratoře.

V roce 1989 byl zakoupen práškový difraktometr URD6 s generátorem IRIS a o čtyři roky později se profesorovi Loubovi podařilo uspět se svým projektem u Grantové agentury ČR a v roce 1994 byl zakoupen čtyřkruhový difraktometr CAD4-MACHIII, umožňující změřit experimentální data pro jeden krystal v průměru během jednoho týdne. Potřeby chemického výzkumu na katedře a spolupracujících ústavech brzy vyčerpaly možnosti tohoto zařízení a v roce 2000 bylo proto vytvořeno, opět díky GAČR, metodické **Centrum molekulových a krystalových struktur**, jehož nejpodstatnější částí je difraktometr se CCD plošným detektorem, díky němuž se řádově zvýšil počet stanovovaných krystalových struktur.

Současný stav experimentálního vybavení :

- Čtyřkruhový difraktometr Nonius KappaCCD se 3kW zdrojem FR590, rok instalace 2000,
- Čtyřkruhový difraktometr CAD4-MACHIII s 3kW zdrojem FR590, rok instalace 1994,
- Chladicí zařízení Oxford Cryostream - rozmezí teplot 80-325K, rok instalace 1998,

- Práškový difraktometr URD6 se zdrojem IRIS, rok instalace 1989,
- 3x Mikrometa II se Debyeovými-Schrererovými komůrkami, Weissenbergovým goniometrem a precizní komůrkou.
- Monokrystalovým metodám se věnují tři stálí pracovníci (I. Císařová, R. Gyepes, P. Vojtíšek), práškovým metodám také tři (R. Gyepes, D. Havlíček, V. Pitterová)

Zaměřením pracoviště je strukturní analýza malých molekul, tedy látek od minerálů až po sloučeniny s několika sty nevodíkových atomů v základní buňce. Vedle laboratoří přírodovědecké fakulty centrum spolupracuje s výzkumnými skupinami z následujících ústavů:

Fyzikální ústav AV ČR,  
Geologický ústav Praha,  
Matematicko-fyzikální fakulta UK,  
Univerzita Pardubice,  
Ústav anorganické chemie AV ČR,  
Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR,  
Ústav organické chemie a biochemie AV ČR,  
Ústav základů chemických procesů AV ČR,  
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,

Za prvních dvě stě dnů roku 2001 bylo změřeno 205 krystalů. Metoda práškové difrakce je využívána především pro výzkum nových anorganických materiálů na katedře.

Jedním z hlavních cílů laboratoře je učinit strukturní stanovení snadno a rychle dostupným, aby se výsledkům této unikátní metody mohla těšit široká vědecká komunita.

Šířením významu strukturní analýzy tak naplňuje laboratoř geniální ideu svého věhlasného předchůdce, která je patrná z dochovaného útržku dopisu velikána Albertu Einsteinovi, v té době věnujícímu se studiu fotoefektu.

*Psáno v Praze, 18.2.1905*

*„Poté jsem upravil ohnisko kyvadlové lampy a získal kvanta záření. Mohl jsem tak konečně dojít cíle nejvyššího a osvětliti jeho<sup>1</sup> strukturu, neboť struktura, Alberte, jest v jádře všeho.“*

<sup>1</sup> Zbylé části dopisu jsou nenávratně ztraceny, a tak není známo, zda Cimrman určil strukturu fotonu nebo krystalu své oblíbené látky.