



## Lectures - Thursday, June 17

L22

Center of Molecular and Crystal Structures at the Faculty of Science, Charles University in Prague

### CENTRUM MOLEKULOVÝCH A KRYSTALOVÝCH STRUKTUR NA PŘÍRODOVĚDECKÉ FAKULTĚ UK V PRAZE

I. Císařová

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta,  
Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 8, Praha 2, 128 43  
cisarova@natur.cuni.cz*

Studium krystalové struktury pomocí difrakce rtg. záření je v chemické sekci Přírodovědecké fakulty tradičně součástí katedry anorganické chemie. Zaslouhou prof. Josefa Louba byly od šedesátých let minulého století používány difrakční metody jak k analýze monokrystalů, tak ke kvalitativní a kvantitativní fázové analýze a to navzdory chudému experimentálnímu vybavení. Zásadní přelom v přístrojovém parku nastal po roce 1994 a to zejména díky Grantové agentuře České republiky, pořízením čtyřkruhového difraktometru CAD4-MACHIII. V roce 2000 pak bylo vytvořeno, díky projektu metodických center GAČR, *Centrum molekulových a krystalových struktur*, jehož nejdůležitější částí je difraktometr Nonius KappaCCD s plošným detektorem umožňujícím stanovit tři krystalové struktury malých molekul denně. Možnosti práškových metod se pak podstatně rozšířily nákupem difraktometru Philips XPertPRO v roce 2009.

Oblasti studia se dělí na:

- I. struktury monokrystalů
  - a) nově připravené látky v oblasti chemie (anorganická a organická)
  - b) minerály
  - c) přírodní látky
- II. práškové metody
  - a) kvalitativní a kvantitativní fázová analýza
  - b) stanovení velikosti částic

V současné době přímo s experimentálními přístroji pracuje pět lidí (dva na monokrystalovém difraktometru a tři na práškovém). Na ně pak navazuje skupina pracovníků zpracovávajících experimentální data. Strukturální analýza je předmětem jednohodinové přednášky a tři úlohy z této oblasti jsou součástí praktika z fyzikálních metod studia anorganických látek.

L23

X-ray Analysis at the Institute of Solid State Chemistry in Institute of Chemical Technology, Prague

### RTG ANALÝZA NA ÚSTAVU CHEMIE PEVNÝCH LÁTEK VŠCHT V PRAZE

J. Rohlíček, B. Kratochvíl

*Ústav chemie pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze  
rohlicej@vscht.cz*

#### Historie

Ústav odvozuje svoji tradici z dřívější katedry mineralogie. Již v roce 1835 první katedrový profesor F. X. M. Zippe vytvořil mineralogickou sbírku, kterou postupným rozšiřováním dovedl k vrcholu profesor A. Ondřej (1887 - 1956). Mineralogická sbírka je dodnes chloubou celé školy. V roce 1945 byla na tehdejší katedře mineralogie zavedena metodika RTG difrakční analýzy, která je hlavní analytickou metodikou současného ústavu.

#### Výzkumné aktivity

Výzkum na Ústavu chemie pevných látek můžeme rozdělit do dvou skupin: aplikovaná mineralogie (chemie anorganických pevných látek) a aplikace RTG difrakčních

metod ve farmaceutickém průmyslu (chemie organických pevných látek).

Skupina aplikované mineralogie se zabývá studiem geochemických vlastností arsenu, selenu a antimonu v modelových roztocích a přirozených složkách prostředí. Součástí výzkumu je i příprava a charakterizace nových adsorbentů jednoduchou chemickou úpravou povrchů aluminosilikátů, které lze použít k odstraňování těchto prvků z kontaminovaných systémů. Novým tématem je rovněž aplikace přírodních a upravených sorbentů k čištění vod obsahujících léčiva.

Hydrotermální přepracování amorfních prekurzorů (popílků, geopolymery, skla) na zeolitové fáze je další aktivitou skupiny. Získané sorbenty vyhovují nárokům pro záchyt těžkých kovů a amoniakálního dusíku z přírodních recipientů.