

## CENA EVROPSKÉ KRYSTALOGRAFICKÉ ASOCIACE UDĚLENA POPRVÉ ČESKÉMU VĚDCI

V neděli 28. srpna 2016 byla na otevíracím ceremoniálu konference ECM 30 v Basileji udělena devátá Perutzova cena, Max Perutz prize. Jejím držitelem se stal Dr. Václav Petříček z Fyzikálního ústavu AV ČR, a to za vývoj krystalografického programu JANA. Perutzova cena se uděluje dvakrát za tři roky a vedle ceny Ewaldovy, kterou uděluje každý třetí rok Mezinárodní krystalografická unie, se jedná o nejvyšší ocenění, kterého lze na mezinárodním poli v oboru krystalografie dosáhnout. Důležitost ceny nejlépe ilustrují osobnosti, které ji dosud obdržely: Ada Yonath, Jochen R. Schneider, Carmelo Giacovazzo, George Sheldrick, Eleanor J. Dodson, David Stuart, Claude Lecomte, Hartmut Fieß, Randy J. Read a John Helliwell. Pro Českou krystalografii je to potvrzení jejího současného významu a stále rostoucího vlivu v mezinárodní krystalografické komunitě.

Co tomuto úspěchu předcházelo? Václav Petříček dostal cenu za vytvoření krystalografického výpočetního programu JANA [1], tedy za podobnou činnost, za jakou cenu dříve obdrželi Carmelo Giacovazzo (programy SIR a EXPO na řešení fázového problému přímými metodami, [2]) a George Sheldrick (program SHELX na upřesňování struktur z monokrystalových difrakčních dat, [3]). Tyto tři výjimečné osobnosti mají mnoho společného: v pravý čas se dostaly k vědeckému tématu, které bylo teoreticky více méně zvládnuté, ale málokdo dovedl teorii aplikovat, k tématu, které si přímo říkalo o vytvoření počítačového programu. Václav, Carmelo a George své programy nejen opravdu napsali, ale - narozdíl od jiných vědců, kteří by se pak vrhli na další zajímavý problém a možná by obrželi své ceny v oboru fyziky, chemie nebo biologie - tito pánové ve vývoji svých programů pokračovali a zasvětili jejich tvorbě celý život.

Úspěch programu JANA je o to více fascinující, že Václav obýval tu stranu železné opony, která vědecké práci příliš nepřála, a navíc zpracovával téma, které bylo ve své době naprosto okrajové: upřesňování modulovaných struktur. Celá historie JANY začíná v roce 1983, kdy se Václavovi podařilo vycestovat do Buffala, kde začal s vývojem programu na výzvu svého školitele, Phillipa Coppense, který měl o důležitosti modulovaných struktur jasno od samotného počátku. První úspěšné aplikace JANY na modulované struktury nalezneme v pracích [4] a [5]. Bez Phillipa Coppense by program JANA zřejmě neexistoval ve formě, v jaké jej dnes známe, ale na druhé straně, bez Václava by JANA nevznikla vůbec.

Václav, Carmelo a George mají ještě jednu společnou vlastnost – cit pro praxi. JANA nebyla prvním programem na modulované struktury, průkopníkem v této oblasti byl geniální Akiji Yamamoto se svým programem REMOS [6]. REMOS však bylo a je dosti obtížné použít, zatímco JANA byla od verze k verzi k uživatelům stále milejší, a od roku 1996 dokonce dostala své první grafické rozhraní. Uživatelů začalo přibývat po desítkách a program JANA98 už jich měl několik stovek. Popravdě, v oblasti uživatelské přívětivosti vidím svůj skromný díl, kterým jsem přispěl k vývoji JANY: po léta jsem totiž Václavovi trpělivě vysvětloval, co my, běžní krystalografové, ještě dovedeme

uhodnout nebo odvodit a kde už by za nás měl myslet program.

Jedna věc Václava naopak od Carmela a George odlišuje, a to je sklon k universalitě. Zatímco SHELX je celá léta programem pro strukturní upřesňování a SIR nebo EXPO byly vždy programy pro aplikaci přímých metod, program JANA se postupně vyvíjel směrem k systému, který můžeme nazvat „krystalografický výpočetní systém pro upřesňování atomárních a magnetických struktur o libovolné dimenzi z libovolných difrakčních dat“. Současný program JANA pracuje s daty od prášků i monokrystalů, které byly naměřeny rentgenovými, neutronovými nebo elektronovými difrakčními metodami, a dovede počítat struktury běžné, modulované i magnetické. Kromě upřesňování struktur má JANA i četné interpretační nástroje, jako je výpočet a vizualizace Fourierových map nebo výpočty geometrie. JANA obsahuje ve svém kódu téměř veškerou krystalografii a inventura výpočetních metod, které byly Václavem pro tento program vyvinuty nebo zdokonaleny, by byl úkol pro tým výpočetních archeologů.

Čtenáře by určitě zajímalo, jak to vlastně přijde, že Václav Perutzovu cenu ve veliké mezinárodní konkurenci opravdu nakonec dostal, když jeho averze k výborům, komitétům, funkcím, lobování a vědeckému politikaření je takřka absolutní, takže v komisi nemohl mít žádné „svoje lidi“. Jedním z faktorů je rostoucí četnost výskytu modulovaných struktur, které se současnými difraktometry už nelze přehlédnout a řada lidí je zkouší řešit. Modulované struktury jsou oblíbeným nástrojem týrání doktorandů, a Václavova ochota pomoci komukoli s výpočtem modulované struktury je příslovečná. Doktorandi postupně stránu a získávají na vlivu a nakonec muselo nutně dojít k situaci, že Václav pomohl s modulovanou strukturou už skoro každému. Příkladem může být mezinárodní komise, která posuzovala činnost Fyzikálního ústavu v roce 2009: když přišla řeč na program JANA, jeden z věhlasných hodnotitelů, už poměrně v letech, podotkl: tím jsem počítal, když jsem byl student! Velký vliv mají nepochybně také workshopy o programu JANA, kterými prošlo v posledních šesti letech nejméně 1000 účastníků. Nejdůležitějším faktorem je ale to, že vývoj programu JANA nestagnuje a zasahuje i do oblastí, které se nyní v krystalografii považují za přelomové. Především se jedná o elektronovou difrakci, kde JANA zahrnuje i unikátní nástroje vyvinuté Lukášem Palatinusem [7], a dále o neutronovou difrakci na magnetických strukturách, kde Václav realizoval svoji dávnou ideu, že i k těmto problémům se dá přistoupit „krystalograficky“ a využít při výpočtech symetrii difrakčního obrazu [8].

V rámci tohoto příspěvku je zajímavé zmínit, jaké je vlastně využití programu JANA u nás doma, v Česku. To bylo dlouhou dobu komplikováno faktem, že modulované struktury se v domácím materiálovém výzkumu vyskytovaly sporadicky anebo se sem tyto látky dostávaly se zpožděním, tedy už vyřešené (programem JANA v zahraničí). Místní krystalografy rozhodně nelze podezírat z toho, že by program JANA chtěli používat z vlasteneckých důvodů, jako Japonci REMOS, spíše naopak – JANA



byla zde často považována za podivný program, se kterým se člověk dostane leda do potíží, protože krystalografické publikační standardy jsou určeny vlastnostmi programu SHELX. Proto nebyl u nás program JANA využíván ani k řešení běžných problémů chemické krystalografie, ačkoli i zde nabízí nástroje, které jinde k dispozici nejsou. I v této oblasti ale nakonec došlo k pokroku: editoři si postupně zvykli na existenci jiných programů a výstupy JANY, alespoň v krystalografických časopisech, jsou již přijímány bez diskuze. Do JANY je průběžně doplňována většina nástrojů, které se objeví v SHELX nebo v jeho nadstavbách. Pozitivní efekt má také skutečnost, že domácí materiálový výzkum se poslední dobou mimořádně rozvinul a řada nových materiálů se složitou neznámou strukturou vzniká i v Česku. Tuzemských uživatelů poslední dobou přibývá a jejich důvěry si vážime.

Speciální kapitolou je Grantová agentura ČR. Vývoj JANY v devadesátých letech byl financovaný řadou projektů GA ČR, později si však agentura usmyslela, že psaní programů a vývoj výpočetních metod není věda, to je až když někdo ten program nebo použije na svoje látky. Dalších patnáct let jsme tedy se střídavou úspěšností podávali projekty, kde se JANOU řešily různé dílčí problematiky, a zdálo se, že čím méně obecné je téma projektu, tím více roste naděje na zaslání projektu zahraničním hodnotitelům, kteří obvykle - narozdíl od domácích hodnotitelů - význam programu chápou a jeho vývoj podporují. V letošním roce jsme však učinili odvážný, téměř donkichotský, pokus a podali jsme projekt na vývoj verze JANA2018. Úspěch neočekáváme a o negativní posudky se podělíme s ostatními krystalografy na stránkách jana.fzu.cz. V kontextu právě udělené Perutzovy ceny to bude zajímavý vzhled do práce domácích hodnotitelů naší nejdůležitější grantové agentury.

JANA2018, bez ohledu na to, v jakém rámci bude vyvíjena, by měla být přelomová verze, kdy program využije nástroj na kreslení struktur k editaci parametrů krystalové struktury. Za inspiraci poslouží nářky uživatelů,

že ten či jiný program umí něco navíc v oblasti ovládaní, a doufáme, že podstatné praktické rysy různých programů se podaří do JANY2018 dodat, tak říkajíc, „bez újmy na obecnosti“. Lépe přístupné by se měly stát i výsledky výše zmíněných projektů GA ČR.

Zdá se, že Václav Petříček vstupuje nyní do rekapitulčního období, nebo začínají vycházet články o metodách použitých v programu JANA: celkový přehled [9], který způsobil zázračný nárůst IF časopisu Zeitschrift für Kristallographie, článek o problematice nespojitých modulačních funkcí [10] a článek o dvojčatění [11]. Držme mu palce, aby toho ještě hodně stihnul!

1. <http://jana.fzu.cz>
2. <http://www.ba.ic.cnr.it/content/software>.
3. <http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/>
4. Leung, P.C.W., Emge, T.J., Beno, M.A., Wang, H., Williams, J.M., Petříček, V. & Coppens, P. (1984). *J. Am. Chem. Soc.* 106, 7644-7646.
5. Leung, P.C.W., Emge, T.J., Beno, M.A., Wang, H., Williams, J.M., Petříček, V. & Coppens, P. (1985). *J. Am. Chem. Soc.* 107, 6184-6191.
6. Yamamoto, A. (1982). *Acta Cryst.* A38, 87-92.
7. Palatinus, L., Petříček, V. & Correa, C.A. (2015). *Acta Cryst.* A 71, 235-244.
8. Petříček, V., Fuksa, J. & Dušek, M. (2010). *Acta Cryst.* A66, 649-655.
9. Petříček, V., Dušek, M. & Palatinus, L. (2014). *Z. Kristallogr.* 229, 345-352.
10. Petříček, V., Eigner, V. & Dušek, M. (2016). *Z. Kristallogr.* 231, 301-312.
11. Petříček, V., Dušek, M. & Plášil, J. (2016). *Z. Kristallogr.* 231, accepted.

*Michal Dušek,*

*Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Česká Republika*



**Obrázek 1.** Vzhledem k tomu, že v době vydání tohoto čísla nebyly ještě k dispozici fotografie ze slavnostního předání Perutzovy ceny, zařazujeme obrázek z roku 2010, kde Václav Petříček přebírá cenu Nosnice roku – nejvyšší ocenění udělované v oddělení strukturní analýzy Fyzikálního ústavu.