

Ačkoliv se metody rentgenového rozptylu a zobrazovacích technik rozvíjejí více než sto let, je zde stále mnoho nového. Zmíníme alespoň některá témata. Moderní instrumentace umožňuje rychlejší měření nutná pro in-situ a in-operando studia. Experimenty využívající vysoké koherence synchrotronového svazku vedou k metodám s fázovým kontrastem, případně fázovým i absorpčním kontrastem, což vyžaduje sofistikovaný přístup pro rekonstrukci zobrazovaných objektu. Klasické difrakční či maloúhlové rozptylové experimenty zde byly prezentovány zejména ve spojení s mapováním reciprokého prostoru nanostruktur či tenkých vrstev pomocí dvou-rozměrných detektoru. Nechyběla ani strukturní studia slitin nebo biologických makromolekul, krystalů či struktur pro polovodivový průmysl nebo systémů pro

rentgenovou optiku. Část příspěvků byla též věnována teoretickým pracem.

Abstrakty všech 147 přijatých přednášek a posterů byly publikovány ve speciálním čísle *Materials Structure*, díl 23, 3 (2016) <http://www.xray.cz/ms/bul2016-3.htm>.

Vybrané články účastníků konference byly řádně recenzovány a publikovány s volným přístupem ve speciálním čísle časopisu *Journal of Applied Crystallography* v červnu 2017, svazek 50, viz <http://journals.iucr.org/j/issues/2017/03/00/>.

Více informací a konferenční foto i videa lze nalézt na stránkách <http://xtop2016.sci.muni.cz/>.

*Petr Mikulík, předseda konference*

## VZPOMÍNKY

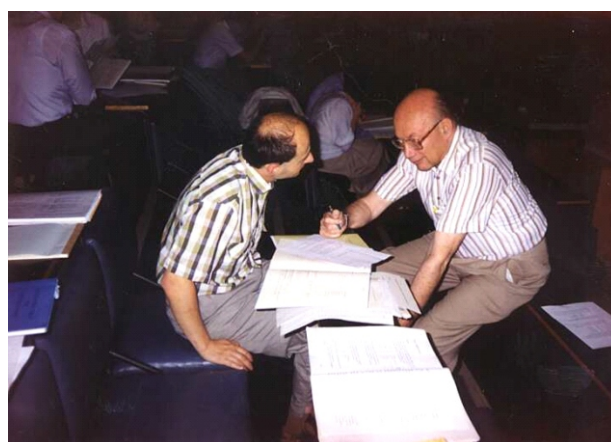
Uplynulé roky a měsíce nepřinášely jen pozitivní zprávy. Odešlo několik osobností tak či onak spojených s Krystalografickou společností. V následujících textech přinášíme několik vzpomínek. Jedná se o čtyři čestné členy naší společnosti. Jsou to dva významní světoví krystalografové, autoři prvního dílu Mezinárodních krystalografických tabulek Theo Hahn a Hans Wondratschek a také Fero Hanic z Bratislavy a Josef Kuběna z MU Brno, dále člen komisi IUCr a přední odborník v oblasti teorie grup Vojtěch Kopský a také Lubo Smrček, jehož náhlý skon prakticky v den odchodu do důchodu byl šokem.

### Hans Wondratschek

(7.3.1925 Bonn - 26.10.2014 Karlsruhe)



Německý fyzik, krystalograf, mineralog a profesor na Karlsruhe Institute of Technology (KIT). Studoval od roku 1945 matematiku a fyziku na univerzitě v Bonnu, kde získal doktorát v roce 1953. V letech 1953-1958 působil jako asistent na Ústavu Maxe Plancka pro výzkum silikátů ve Würzburgu, v letech 1958-1959 byl asistentem na Ústavu krystalografie, ETH Curych a v období 1959-1961



Hans Wondratschek na škole o Mezinárodních krystalografických tabulkách, Praha, 1993

asistentem na Mineralogickém ústavu na univerzitě v Bonnu. V roce 1961 se habilitoval a působil na univerzitě ve Freiburgu. V roce 1964 se stal profesorem mineralogie v Karlsruhe a ředitelem Ústavu krystalografie. V roce 1991 se stal emeritním profesorem. V roce 2001 získal medaili Carla Hermanna a v roce 1987 medaili Friedrich Becke. V roce 1989 se stal členem německé akademie věd Leopoldina v Halle.

Hans Wondratschek začal jako experimentální mineralog, ale postupně se věnoval teoretické krystalografii a teorii grup, později zejména 4D symetriím (odvození 4894 grup) a podgrupám - *Crystallographic groups of four-dimensional space*, Brown, Bülow, Neubüser, Wondratschek & Zassenhaus (1978).

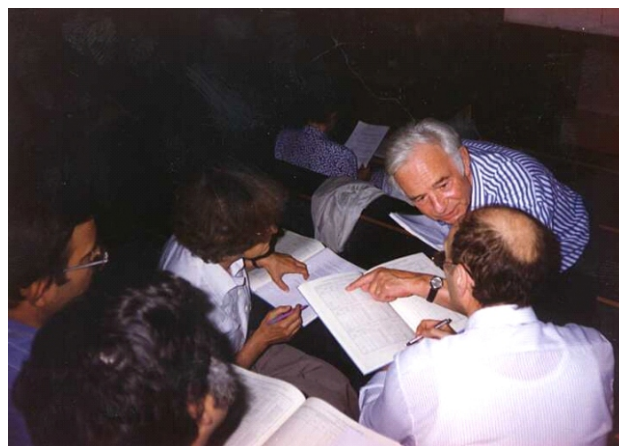
Podílel se na Mezinárodních krystalografických tabulkách. Napsal základní kapitolu 8, *Introduction to space-group symmetry*, další části (1983) a v roce 2004 přispěl do dílu A1 *Symmetry relations between space groups*. Spolu s Theo Hahnem pořádal školy o užití těchto tabulek, zejména prvního dílu, tedy prostorových grup. V Praze byla tato škola pořádána dvakrát v roce 1993 a u příležitosti ECM v roce 1998. V roce 1993 se stal čestným členem naší společnosti. Z těchto škol vznikla i kniha *Symmetry of Crystals*, Th. Hahn, H. Wondratschek (1994).

*vice Acta Cryst. (2015) A71, 253-254*



## Theo Hahn

(3.1.1928 Duisburg - 12.2.2016 Aachen)



Theo Hahn na škole o Mezinárodních krystalografických tabulkách, Praha, 1993

Theo Hahn začal studovat mineralogii a krystalografii na univerzitách v Marburgu (jako student Carl Hermann) a Frankfurtu a v roce 1946 tam získal doktorát (Dr. rer. nat.) s prací zaměřenou na struktury silikátů (*Fluoberyllates as Model Compounds of Silicates*). Posléze pracoval jako postdok pro Martina J. Buergera na Massachusetts Institute of Technology (MIT) v Cambridge, Massachusetts. V Buergerově laboratoři se naučil řešit struktury monokrystalů pomocí rentgenové difrakce a získal lásku k symetrii v krystalografii a umění, i jejím teoretickému popisu.

V roce 1956 se vrátil do Německa a stal se asistentem Mineralogického ústavu ve Frankfurtu, kde se věnoval počítačovým aplikacím a vývoji programů pro řešení struktur. Tomu byla věnována habilitační práce *Methods and Results of the Exact Crystal-Structure Research, Treated on Specific Examples* (1961).

Ve věku 35 let byl jmenován profesorem a vedoucím Krystalografie na Technické univerzitě v Cáchách (RWTH). Vedoucím Ústavu krystalografie zůstal až do svého odchodu do důchodu v roce 1993. Byl také děkanem Fakulty hornictví, hutnictví a geologických věd RWTH Aachen a předsedou německé Mineralogické společnosti.

Theo Hahnovi bylo uděleno několik vyznamenání za vědeckou práci, stříbrná medaile Abrahama Gottloba Wernera německé mineralogické společnosti (1997) a medaile Carla Hermann, medaile Německé krystalografické společnosti (2001). V roce 1993 se stal čestným členem Krystalografické společnosti (viz výše, s Hansem Wondratschkem) a v roce 1997 také Německé krystalografické společnosti.

Pod jeho vedením byla k Ústavu krystalografie RWTH připojena velmi efektivní skupina neutronového nepružného rozptylu se sídlem ve středisku pro jaderný výzkum v Jülichu. Napsal přehledný článek o dvojčatění v krystalech pro díl D Mezinárodních krystalografických tabulek.

V průběhu roku 1972 na IUCr kongresu v Kjótu byl jmenován předsedou revidované Komise mezinárodních tabulek s úkolem editace revidovaného vydání dílu A (Space-Group Symmetry) a napsal tam zároveň několik částí. Mezinárodním tabulkám se pak věnoval i nadále, celkem 35 let, navrhoval doplňky a rozšíření.

Theo Hahn byl členem výkonného výboru IUCr a v letech 1984-87 byl prezidentem unie.

**Krystalografická společnost získala z pozůstalosti Theo Hahna díky jeho rodině jisté finanční prostředky a založila fond Theo Hahna, který by primárně měl sloužit k financování cen studentských soutěží.**

*vice Acta Cryst. (2016) A72, 294-295*

## František Hanic

(16.12.1927 Lastovce -1.12.2014 Bratislava)



Fero Hanic ukončil vysokoškolské studium na ČHTF SVŠT v Bratislavě v roce 1951 a získal vědecké a pedagogické hodnosti na Ústavu fyziky pevných látek ČSAV v Praze, Přírodovědecké fakultě UK v Bratislavě a VŠCHT v Praze. Publikoval přes 200 původních vědeckých prací a je autorem kapitol v několika monografiích, které vyšly v zahraničí, byl zván na mezinárodní kongresy a působil v několika redakčních radách. Od roku 1980 působil jako člen okruhu navrhovatelů kandidátů Nobelových cen za fyziku a chemii. Učil na PRIF UK a podílel se na organizaci a řízení vědy a školství (ředitel ÚACH SAV, 1963-70, od r. 1990 místopředseda SAV, člen komisi COST, IUPAC, vědeckých rad FCHPT STU, PRIF UK).

Jako první začal na Slovensku rozvíjet rtg. strukturní analýzu a touto metodou vyřešil přes 40 krystalových struktur (nejvýznamnější např. vitamínu B6, difosforečnan hořečnato-sodný). Rozpracoval teorii strukturních polí a využil definice jejich hranic a překryvů k předpovědím existence nových fází a typů modifikačních změn v zemské kůře.



Precesní komora F. Hanice



Josef Kuběna

Jeho zájmy byly velmi široké a zahrnovaly monokrytalovou i práškovou difrakci. Zkonstruoval i vlastní precesní komoru, která se v některých významných detailech lišila od Buergerova modelu a vyráběla se i komerčně. Stál také u počátku výzkumu koordinačních sloučenin.

Přednáškou „Vplyv štruktúrnych vlastností vody a fázových premien minerálov na pohyb kontinentov v gravitačných poliach (doplňok princípov globálnej tektoniky)“ zahájil 29. 11. 2007 274. Rozhovory jako čestný člen KS. Byla mu dále udělena Zlatá medaile SAV, vyznamenání Za zásluhy o výstavbu, medaile Rumunské akademie věd a Zlatá medaile Slovenskej chemickej spoločnosti.

Výběr problematiky pro něj nikdy nebyl náhodný, ale vycházel z aktuálních vědeckých trendů a technologických potřeb (katalyzátory, antioxidantní a hydrogenační systémy, keramické materiály; superiontové pevné elektrolyty, fázové rovnováhy ve vícesložkových vysokoteplotních oxidových systémech, vysokoteplotní supravodiče, plazmochemický výzkum).

Zajímal se i o takové problémy jako vznik života na Zemi, geofyzikální účinky elektromagnetických a gravitačních polí, vývoj nových forem energie, likvidace odpadů.

Docent Dr. Ing. František Hanic, DrSc. významně ovlivnil současný stav krystalografie, anorganické chemie a chemie materiálů.

*zkráceno dle*

*[http://www.sav.sk/index.php?doc=services-news&source\\_no=20&news\\_no=5683](http://www.sav.sk/index.php?doc=services-news&source_no=20&news_no=5683).*

*D. Gyepesová, P. Komadel  
a doplněno*

### Josef Kuběna (17.3.1935 – 4.6.2016)

Náš dlouholetý kolega doc. RNDr. Josef Kuběna, CSc. nás opustil po dlouhé nemoci v červnu 2016. Josef Kuběna vystudoval fyziku na univerzitě v Brně v r. 1960 a nastoupil na Katedru fyziky kondenzovaných látek na přírodovědecké fakultě. Jeho kandidátská dizertační práce pod vedením prof. Černohorského obhájená v roce 1969 se týkala analýzy linií práškových difrakčních čar a Josef Kuběna se tak stal jedním ze zakladatelů rtg. difrakce na Univerzitě J. E. Purkyně v Brně (nyní Masarykova univerzita). Hluboké znalosti fyzikální optiky mu umožnily zabývat se detailně fyzikou rtg difrakce, nejdříve na polykrystalických vzorcích a během 70. let na polovodičových monokrystalech a později epitaxních vrstvách. Ve spolupráci s výzkumným oddělením Tesly Rožnov (nyní On Semi Rožnov p. R.) dosáhl pozoruhodných výsledků ve studiu reálné struktury Si desek, zejména

mikrodefektů (swirls, precipitáty  $\text{SiO}_2$ ). Patřil k průkopníkům metody rtg topografie, kterou používal na zviditelnění defektů v deskách. Během sedmdesátých a na počátku 80 let vlastnoručně postavil prvním vícekrystalový rtg difraktometr s vysokým rozlišením, který umožnil studovat mikrodefekty metodou rtg topografie v rovinné vlně a měřit mapy difuzního rozptylu od mikrodefektů v reciprokém prostoru. V devadesátých letech upřel svou pozornost na studium kinetiky nukleace a růstu mikrodefektů v Si a vypracoval teoretický popis nukleace precipitátů  $\text{SiO}_2$  při žhání desek Si připravených Czochralského metodou.



Josef Kuběna v 60. letech.



Na 250. Rozhovorech, ÚMCH AVČR Praha 2001.



Na konferenci EPDIC X v Ženevě

Měl jsem tu čest spolupracovat s Josefem Kuběnou takřka třicet let. Za tuto dlouhou dobu jsem se nejen naučil, co znamenají Millerovy indexy a jak vypadá reciproká mřížka Si, ale snažil jsem se osvojit jeho cílevědomost a trpělivost při řešení složitých (nejen) fyzikálních problémů. Bude nám všem velmi chybět.

*Václav Holý  
Katedra fyziky kondenzovaných látek  
MFF UK, Praha a CEITEC MU Brno*

K dalším dvěma osobnostem byly použity původní nezkrácené texty napsané pro IUCr a volně přeloženy.

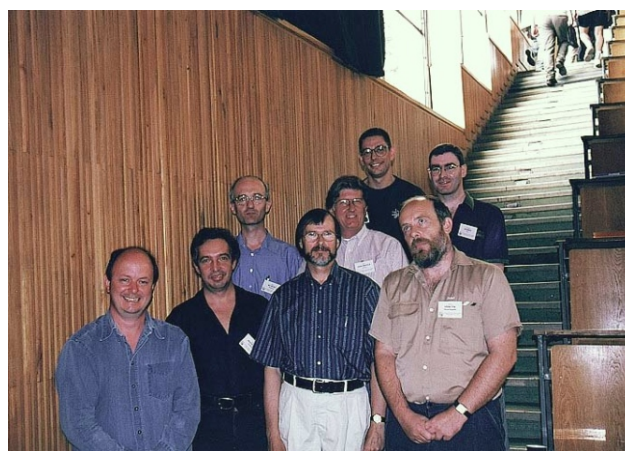
### Lubomír Smrčok (10.8.1954 – 11.8.2016)



Poslední akce - 300. Rozhovory v Praze na Petřinách.

Je mojí smutnou povinností oznámit, že už s námi není Lubomír Smrčok. Narodil se 10. srpna 1954 v Bratislavě na Slovensku a náhle odešel 11. srpna 2016 ve stejném městě. Zanechal zde svou manželku, syna a sestru.

Moje vzpomínky na Luba se vracejí do roku 1980, kdy se poprvé zúčastnil konference Krystalografické společnosti v Praze. Již na tomto setkání velmi otevřeně vyjadřoval své názory, ačkoli v době komunistické vlády to nebylo nejdiplomatičtější. Po ukončení doktorského studia na Ústavu anorganické chemie Slovenské akademie věd



E. Smrčok v sekci Structure Determination by Powder Diffractometry na ECM 1998 v Praze.

pokračoval ve své vědecké práci a nakonec se stal vedoucím oddělení teoretické chemie.

Rozsah jeho práce byl široký, zahrnující anorganickou, metaloorganickou a organickou chemii, s využitím většího rentgenových a neutronových difrakčních technik na monokrystalických i polykrystalických materiálech, v kombinaci s teoretickými výpočty DFT (density functional theory). Jeho vědecká práce vyústila ve stovky příspěvků na různých konferencích (např. Kongresy EPDIC, ECM a IUCr) a publikace, často v časopisech IUCr.

Lubo byl aktivním členem komise IUCr pro práškovou difrakci v letech 2008-2014. Podílel se na přípravě různých konferencí pořádaných touto komisí a byl předsedou Organizačního výboru SSPD03 (řešení struktur z práškových difrakčních dat) ve Staré Lesné, ve své milované části Slovenska - v Tatrách.

V roce 2014 (společně s Dr. Dalmou Gyepesovou) úspěšně přesvědčil úřady, aby vydaly slovenskou poštovní známku k Mezinárodnímu roku krystalografie (IYCr 2014); práce na tomto projektu vyžadovaly dva roky jednání a diskuzí.

Bude nám všem chybět a vyjadřujeme jeho rodině hlubokou soustrast.

*Vratislav Langer,  
Gothenburg, Švédsko  
langer@chalmers.se*

**Vojtěch Jaroslav Kopský (1936–2016)**

Vojtěch Jaroslav Kopský, český matematický fyzik, krystalograf a pedagog, zemřel 14. května 2016 ve svém rodném městě v Praze po dlouhé nemoci nemnoho měsíců po 80. narozeninách. Narodil se v Praze v roce 1936. Studoval na Fyzikální fakultě Univerzity Karlovy v Praze v letech 1954 a 1955, poté na Fakultě matematiky a fyziky na Leningradské státní univerzitě, kde získal magisterský titul. Začátkem šedesátých let pracoval v Praze jako fyzik v Ústavu vakuové elektroniky a Ústavu telekomunikací. Po doktorském studiu na Ústavu fyziky pevných látek Akademie věd ČR se Kopský stal vědeckým fyzikem na katedře dielektrik Fyzikálního ústavu v roce 1969 a získal doktorát Československé akademie věd v roce 1970. Od roku 1979 až do odchodu do důchodu v roce 2008 pracoval jako vedoucí vědecký pracovník na katedře teoretické fyziky Fyzikálního ústavu.

Během kariéry se Kopského výzkum zaměřoval na teorii grup a jejich uplatnění ve fyzice pevných látek, zejména na fázové přechody a tenzorové vlastnosti materiálů a domén. Tato studia vyvrcholila komplexními tabulkami tenzorových parametrů feroických přechodů. Jeho zájem a práce na teoretických základech uplatnění teorie grup v krystalografii vedly k publikacím o struktuře grup a vztazích mezi krystalografickými grupami, zejména mezi trojrozměrnými prostorovými skupinami a subperiodickými grupami. To vedlo Kopského a DB Litvína k tomu, aby se stali spolueditory a spoluautory dílů E, subperiodických grup, Mezinárodních krystalografických tabulek. S V. Janovcem, spoluautorem kapitoly ve svazku D, Fyzikální vlastnosti krystalů, z téže série a s P. Bockem napsal soft-



Na ECM-18 v roce 1998 v Praze v sekci Symmetry.

ware, který byl zařazen do svazku D. V. Kopský byl také členem komisi IUCr pro mezinárodní tabulky a pro krystalografickou nomenklaturu.

Vojtěch Kopský napsal více než sto populárních článků o fyzice a matematice pro český vědecký časopis pro mládež. V jeho rozmanitých zájmech byly zahrnuty dva patenty týkající se "Square-1" - Rubikově kostce podobné trojrozměrné puzzle (teoreticky založené na permutačních grupách), kterou vyrobila kanadská firma.

Vojtěch Kopský absolvoval výzkumné pobyty na Ústavu krystalografie sovětské akademie věd v roce 1976 a na Pennsylvánské státní univerzitě v Penn State Berks v letech 1986 a 1990. Jako profesor fyziky působil v letech 1971-1973 na Katedře fyziky univerzity Al Mustansyriyaha v Bagdádu v Iráku a v době 1991-1994 jako docent na katedře fyziky UNU v Suvě na Fidži. Přednášel také na Technické univerzitě v Liberci, kde byl v roce 2001 jmenován profesorem.

Ztratili jsme talentovaného výzkumníka, lektora a popularizátora. Jeho kritické a originální vědecké výsledky základů krystalografie stále čekají na zasloužené hodnocení a uznání.

*D. B. Litvin<sup>a</sup> and V. Janovec<sup>b</sup>*

*<sup>a</sup>Department of Physics, The Eberly College of Science, The Pennsylvania State University, Penn State Berks, PO Box 7009, Reading, Pennsylvania 19610, USA,*

*<sup>b</sup>Institute of Physics AV ČR, Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Czech Republic, janovec@fzu.cz*