

STRUKTURA 2023

Uherské Hradiště, 29.5.-2.6. 2023

Session I, May 29, Monday

L1

POHLED DO HISTORIE KRYSTALOGRAFICKÉ SPOLEČNOSTI

J. Hašek

*Institute of Biotechnology, Czech Academy of Sciences, BIOCEV, Průmyslová 595, 252 50 Vestec
hasekjh@seznam.cz*

Krystalografická společnost v letošním roce oslavuje 70 let od zahájení tradičních Rozhovorů o aktuálních otázkách, které jsou považovány za první aktivitu Krystalografické společnosti a také je 30-ti leté výročí vzniku Redakce Společnosti a vydání a distribuce prvního časopisu Společnosti „Materials Structure“. V tomto příspěvku připomeneme některá fakta o vývoji naší Společnosti.

Je všeobecně známé, že dějiny se píší vždy až když pamětníci zemřou nebo mají strach protestovat. Z tohoto hlediska je třeba vnímat i tento příspěvek. Období do roku 1978 znám pouze z dochovaných dokladů. V roce 1978 jsem byl dr. Alanem Linkem požádán, abych zajišoval činnost tehdejší „Odborné skupiny pro studium jemné struktury materiálů ionizačním zářením“. Následujících 45 let jsem se buď osobně zúčastnil, nebo ovlivňoval velkou část událostí, které se v rámci této organizace odehrály. Krystalografická společnost poskytovala svoje služby všem odborníkům z oboru, kteří o ně měli zájem. Proto je výčet její činnosti velice obsáhlý. Čítá 307 jednodenních seminářů (Rozhovorů) a více než 100 několikadenních konferencí. Na organizaci jejich akcí se významně podílelo více než sto lidí. Časopis „Materials Structure“ je vydáván již 30 let a je tak velice dobrým dokumentem o vývoji krystalografie v Čechách a na Slovensku.

Počátky organizace života krystalografů

Ve starověku byl zájem pouze o technické vědy využitelné ve vojenství a mineralogii spojenou s hornictvím. Rozhodně ale nešlo o masovou záležitost. Zájem o přírodní vědy stoupá až během průmyslové revoluce během 18 a 19. století. **Královská česká společnost nauk** vznikla na přelomu 60. a 70. let 18. století. První dochovalý písemný záznam je z roku 1784).

Česká akademie císaře Františka Josefa pro vědy, slovesnost a umění (ČACFJVSU) vznikla 9. října 1888 schválením zemským sněmem Království českého. Její stanovy odsouhlasil 23. ledna 1890 císař František Josef I. Podnikatel J. Hlávka pronajal za 200 tisíc zlatých pro Českou akademii část prostor v Národním muzeu na Václavském náměstí postaveném v letech 1885–1891 místo zbořeného koňské brány. J. Hlávka se potom stal prvním předsedou České akademie (1890–1908) a majetkově a zájmově ji propojil s **Nadáním Josefa, Marie a Zdeňky Hlávkových** založeným 1904.

V roce 1918 byla císařská ČACFJVSU přejmenována na **Českou akademii věd a umění (ČAVU)**. Tuto instituci nyní Akademie věd ČR považuje za svoji předchůdkyni. **Kromě ČAVU byla v roce 1920 založena Masarykova akademie práce (MAP)** sdružující organizace technické práce v Československu a v roce 1924 přibyla **Československá národní rada badatelská (ČSNRB)** zastupující československou vědu ve vztahu k mezinárodním vědeckým institucím.

Členství Československého národního komitétu v IUCr bylo od roku 1948 financováno touto Radou vlády pro zahraniční styky přes Přírodovědeckou fakultou Karlovy Univerzity. Později tuto roli převzala Československá akademie věd (ČSAV) a členský poplatek byl hrazen z rozpočtu zahraničního odboru ČSAV až do roku 2017. Právníci AV ČR zrušili v tomto roce možnost financování komitétů přes AV ČR a proto je od roku 2018 členský poplatek v IUCr hrazen Krystalografickou společností. **Komitét IUCr je tedy součástí právnické osoby Krystalografická společnost, která nyní platí členské příspěvky.** Komitét nemá svoji právní subjektivitu a obvykle zasedá společně s Krystalografickou radou společnosti.

Již počátkem 20. století byly prováděny pokusy s rtg zářeními ve Škodových závodech, na mineralogické fakultě, v Ústavu technické fyziky, atd. Odeznělo také několik přednášek a kurzů, vyšlo několik skript a brožur věnovaných výzkumu pomocí rtg záření, ale soustavně se organizací krystalografie nikdo nezabýval.

Po konci 2. světové války si všechny průmyslově vyvinuté státy uvědomily, že vítězství bylo podmíněno zejména kvalitou průmyslu a úrovní rozvoje vědy. Proto všechny pokročilé státy v té době masivně investovaly do výzkumných pracovišť a univerzit. V Československu tento trend znamenal ne příliš účelné investice do rezortních ústavů u výrobních podniků – většina v 90-tých letech nepřežila nástup konkurence. Naopak, soustředění několika již existujících a založení desítek nových výzkumných ústavů v Akademii věd se ukázalo natolik efektivní, že AV ČR se po otevření Československa světu hned dostala mezi nejlépe hodnocené výzkumné organizace ve světě.

Krystalografové jakožto experimentální obor měli v době studené války velký problém s přístrojovým vybavením. Československo jako technicky nejrozvinutější země východního bloku neměla kvůli přísnému embargu



kam zboží efektivně vyvážet a odkud dovážet kvalitní technologie a součástky. Skupině odborníků kolem Adély Kochanovské se sice podařilo přimět CHIRANU vyrábět většinu přístrojů pro X-ray filmové metody, ale celý program byl vysoce ztrátový, protože nebyl odbyt. Nástup počítačového zpracování obrazu znamenal úplný zánik projektu, protože vývoj automatických difraktometrů by byl mnohonásobně dražší a odbyt by byl minimální. Během 70-tých let výroba prakticky zanikla. Po otevření trhu do světa výroba v českých pobočkách CHIRANY zcela zanikla. Nicméně, slovenská CHIRANA se po otevření světového trhu uchytila a úspěšně produkuje rtg a další zařízení pro zdravotnictví.

Rozhovory – jednodenní putovní semináře o problémech strukturní analýzy

Počátky soustavné organizace krystalografické komunity a snahy o vytvoření podmínek pro pravidelnou komunikaci mezi pracovišti zabývajícími se rtg strukturní analýzou lze však vystopovat už v roce 1953. První „Rozhovory o aktuálních otázkách v mikrorentgenu“ organizované prof. Kochanovskou se odehrály před 70 lety v budově nově založené Československé akademie věd (ČSAV) na Národní třídě. Pozvánky a zápisy ze schůzí byly psány průklepy na psacím stroji. První záznam v archivu Krystalografické společnosti je až o 4. Rozhovorech 21. dubna 1954, které se konaly v Ústavu Technické Fyziky ČSAV (dnes FzÚ AV ČR v Cukrovarnické ulici). Až do 26. Rozhovorů pozvánky rozesílal ředitel ÚTF ČSAV dr. Jindřich Bačkovský. Schůze v té době řídily a zápisy podepisovali obvykle dr. Simerská a doc.dr. Kochanovská.

Vznik „Odborné skupiny pro studium struktury materiálů“

Na 27. Rozhovorech dne 12.6.1957 byla ustavena „Pracovní skupina pro studium jemné struktury materiálů“ pod hlavičkou krajského výboru Československé vědeckotechnické společnosti – odborné skupiny pro hutnictví a slévárství (ČSVTS HS). Rozhovory se konaly buď v budově ČSAV na Národní třídě a nebo v některém hostitelském ústavu. Od 56. Rozhovorů 31.5.1962 jsou pozvánky podepisovány prof. dr. A. Kochanovskou a dr. M. Rozsívalem (ředitel ÚFPL-nově přejmenovaný ÚTF).

75. Rozhovory 19.4.1966 podepsané prof. Kochanovskou byly již pořádané „Odbornou skupinou pro studium jemné struktury materiálů ionizačním zářením“, Komise jaderné techniky Ústřední rady ČSVTS. Pod touto hlavičkou byly Rozhovory pořádané až do zřízení samostatné Krystalografické společnosti v roce 1991. Od 91. Rozhovorů se na pozvánkách podepisuje také dr. K. Melka (tajemník OS). Od 103. Rozhovorů (4. 1. 1971) se na pozvánkách objevuje též jméno dr. Karla Humla a stále častěji je využíván přednáškový sál v ÚMCH AV ČR na Petřínách.

Programy Rozhovorů jsou k dispozici na WEBU Krystalografické společnosti od roku 1995, tj. pozvánky na 229-306 Rozhovory. Pozvánky a zápisy z dřívějších Rozhovorů jsou k dispozici pouze v papírové formě v archivu Krystalografické společnosti.

Zpočátku byla činnost odborných skupin předcházejících vzniku Krystalografické společnosti soustředěna kolem silných osobností jako byla prof. Kochanovská

a dr. Línek. V průběhu osmdesátých let činnost postupně nabývala charakteru spolku a až v roce 1991 byla vytvořena samostatně fungující společnost. Zejména zpočátku měla na činnost skupiny zásadní vliv dvojice předseda-tajemník. Z archivu vyplývá, že v padesátých letech byly Rozhovory organizovány prof. Kochanovskou a dr. Kohlem. Od roku 1966 to byla dvojice (prof. A. Kochanovská - ing. B. Rada), od roku 1968 (prof. A. Kochanovská - dr.K. Melka), od roku 1975 (dr. A. Línek-Ing Nehasil), od roku 1978 (dr. A. Línek- J. Hašek). V roce 1978 na konferenci v Modré u Bratislavy byl tajemníkem zvolen Jindřich Hašek z Ústavu makromolekulární chemie AV ČR. Ten kromě Rozhovorů zorganizoval do roku 1985 několik týdenních kurzů se zvanými přednášejícími plně pokrývající jednotlivé oblasti krystalografie.

Do roku 1985 byla činnost Odborné skupiny formálně reprezentována pouze předsedou a tajemníkem. K vytvoření vnitřní struktury odborné skupiny došlo na kolokviu v Jenišově na Lipnu v květnu 1985. Od té doby je organizace řízena volenou Krystalografickou radou. Rada následně volí funkcionáře výkonného výboru a rozhoduje o odborných komisích. Do vedení odborné skupiny byli v té době zvoleni J. Hašek (předseda) a V. Valvoda (tajemník). Od roku 1989 to byli J. Hašek a R. Černý. V roce 1990 se stal tajemníkem společností R. Kužel. Byly také jmenovány komise pro řešení jistých speciálních problémů v té době zajímavých. Tato struktura zůstala i po vytvoření samostatné Krystalografické společnosti v roce 1991. Od roku 1991 byli do vedení opakovaně voleni J. Hašek (předseda) a R. Kužel (tajemník). Od roku 2018 je součástí struktury Společnosti též Komitét IUCr.

Počínaje konferencí „Aplikace strukturní analýzy v materiálovém výzkumu“ v Jenišově na Lipně v květnu 1985 běží prakticky každým rokem standardní výroční konference (zvaná později STRUKTURA), kde si účastníci konference kromě několika zvaných přednášek sami hlásí svoje vlastní příspěvky.

Vznik právnické osoby „Krystalografická společnost“

Do roku 1991 nebyla Odborná skupina samostatnou právnickou osobou. Neměla samostatné účetnictví a každá akce musela být pod hlavičkou nějaké „zastřešující“ právnické osoby a musela začínat a končit s nulovým kontem. Dokumenty se stávaly právně definovatelné jen prostřednictvím podpisu. Pro organizaci větších akcí a pro vydávání vlastního časopisu to byla zcela neúnosná situace.

Návrh na vytvoření samostatného občanského sdružení Krystalografické společnosti a „Stanovy Krystalografické společnosti“ byly předloženy k veřejné diskusi shromáždění krystalografů na kolokviu v Malé Morávce v říjnu 1988. Ministerstvo vnitra zaregistrovalo Krystalografickou společnost dne 6.2.1991 podle zákona č. 83/1990 Sb pod jednacím číslem VSP/1-4934/91R a s DIČ 006-18628192. Nově vzniklá Krystalografická společnost se přihlásila do v té době nově vytvořené Rady vědeckých společností. Tato rada zastupuje členské společnosti ve vztahu ke státnímu rozpočtu a vzhledem k Akademii věd ČR.

Redakce Krystalografické společnosti byla formálně zaregistrována 31.5.1994. Od té doby společnost označuje neperiodické publikace vlastním mezinárodním číslem

ISBN a vydává vlastní odborný časopis “Materials Structure” pod mezinárodním kódovým označením ISSN 1210-8529.

Osamostatnění rozpočtu Krystalografické společnosti vedlo k tomu, že v krátké době byla Krystalografická společnost schopna samostatně financovat vydávání vlastního časopisu “Materials Structure”, pořádat velké konference, např. Evropskou krystalografickou konferenci s 1200 účastníky v roce 1998, celosvětový krystalografický kongres v roce 2021, samostatnou výstavu “Struktura mikrosvěta” v přízemí Národního muzea, zajišťovat pronájem a provoz strukturních databází a významně dotovat některé další akce obecného zájmu, např. přehlídky studentských prací, atd.

Publikační činnost Krystalografické společnosti

Již v roce 1980 vznikla idea dopravit členům společnosti společně s pozvánkou na semináře i další informace. Nebylo to snadné, protože v té době byly možnosti tisku omezené a tiskárny nekvalitní. Tisk původní proto-formy Bulletinu na počítači sice umožnil tisk konkrétních adres přímo do každého bulletinu, takže vhodným složením skládky vznikl dopis již s přetištěnou adresou. Tisk na jehličkové tiskárně byl ale velmi nevzhledný. Odborná skupina nebyla právníčkou osobou a tak ani nemohla mít vlastní finance. Proto v té době vše probíhalo přes pověřené “zastřešující organizace”. Financování běžící přes účtárnu KJT ČSVTS nebo přes Domy techniky znamenalo, že každá akce začínala s nulou na účtu a musela končit s nulou na účtu. Takže jsme Bulletin tiskli vždy jako součást nějaké akce, kde se vybíralo vložné. Podle zásady pokud si někdo nestěžuje, vše je povoleno. Tisk Bulletinu tedy bylo možné realizovat jen v rámci kolokvií, na které bylo vybíráno vložné, obvykle jen jednou v roce a to tou nejlacinější formou.

V roce 1986 přichází se svojí iniciativou také S. Ďurovič, který inicioval a po dobu pěti let řídil “Komisi pro krystalografické názvosloví”. Z. Weiss, který byl místopředsedou této komise, zajistil tiskárnu v Ostravě nejen pro tisk “Krystalografického názvosloví” ale uvolil se být též technickým redaktorem Bulletinu. J. Fiala přijal funkci odborného redaktora a v letech 1986-1993 vznikla série jedenácti modře pruhovaných brožur. V roce 1990 již nebylo možné tisk realizovat “Ostravskou cestou” a proto technická část realizace přešla zpět do Prahy.

Časopis Materials Structure

Po vzniku Krystalografické společnosti jako samostatné právnické osoby v roce 1991 jsme mohli přejít na vydávání technicky a finančně náročnější formy odborného časopisu. Redakce Krystalografické společnosti byla úředně zaregistrována podle nových zákonů v roce 1993. Formálně se tak stalo až 31.5.1994. Od té doby společnost označuje neperiodické publikace vlastním mezinárodním číslem ISBN a vydává vlastní odborný časopis “Materials Structure” pod mezinárodním kódovým označením ISSN 1210-8529. Redakce získala oprávnění přidělovat vlastní čísla ISBN a ISSN a vyšel první sešit časopisu Materials Structure v novém formátu.

Jeho zařazení do seznamu registrovaných časopisů pro výpočet impakt faktoru však není možné. Velkým tiskařským koncernům se podařilo prosadit velice sporné

hodnocení lidí podle impact faktoru časopisu. Zavedení nově vznikajícího časopisu proto vyžaduje obě• několika desítek vědců, kteří ztratí drahocenné impakt faktory po dobu několika let potřebných k výpočtu impakt faktoru. Nelze se proto divit většině vědců, kteří řídí své publikační aktivity podle impakt faktorů a kupují si za státní peníze vysoké impakt faktory od tradičních vydavatelských firem.

Serie konferencí ke specializovaným oblastem krystalografie

Krystalografická společnost uspořádala 14 mezinárodních konferencí z pověření mezinárodních nevládních organizací a také několik serií konferencí orientovaných na speciální témata v krystalografii.

Dále byla spoluorganizátorkou série deseti RPKD konferencí (**Regional Powder Diffraction Conferences**) a série kurzů **Advanced Methods in Bio-crystallization** z pověření Federace Evropských biologických společností **FEBS**.

Serie konferencí „Setkání českých a slovenských strukturních biologů“

S myšlenkou pravidelného ročního setkávání českých a slovenských strukturních biologů přišel a uskutečnil Bohdan Schneider. Jako vhodné místo se ukázalo Akademické a univerzitní centrum v zámku v Nových Hradech. První setkání (14.-16.března 2002) bylo velice úspěšné, protože iniciovalo spolupráci mezi odlišnými fyzikálními metodami zkoumání biologických materiálů – rtg difrakce, neutronová difrakce, malouhlový rozptyl, spektroskopické metody, NMR, molekulární modelování, výpočetní simulace, atd. Prvních devět konferencí strukturních biologů spoluorganizovala Krystalografická společnost s Centrem pro komplexní molekulární systémy a biomolekuly, Ústave fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR, Praha a Ústavem fyzikální biologie Jihočeské university v Českých Budějovicích a publikovala též abstrakty v časopise Krystalografické společnosti „Materials Structure“.

Na „Setkání“ 19. března 2010 byl projednán návrh stanov „České společnosti strukturních biologů“ (ČSSB). Přípravný výbor a též první zvolený výkonný výbor pro období (2010-2015) měl složení Jan Dohnálek, Rüdiger Ettrich, Jindřich Hašek, Richard Hrabal, Bohdan Schneider, Tomáš Obšil, Vladimír Sklenář. Od té doby ČSSB organizuje tyto konference samostatně, ale konferenční abstrakty jsou stále publikovány v časopise Krystalografické společnosti „Materials Structure“ spolupráce obou společností úspěšně pokračuje.



Atributy Krystalografické společnosti

Cechovní právo - žezlo Krystalografické společnosti

Žezlo bylo vyrobeno nezávislou komisí ve složení: **Doc. T. Havlík, dr. F. Eichler a ing. M. Petrák** a bylo oficiálně inaugurováno na kolokviu ve Vojtěchově u Hvozdu na Moravě **18.-22.5.1992**. Žezlo tvoří rentgenové lampy ozdobená krystaly.

- Násada byla vysoustružena mistrnou rukou ctěného velmistra doktora Tomáše Havlíka (Košice).
- Rtg lampa vyrobená proslavenou firmou Chirana státní podnik Modřany, Praha 4, byla věnována tomuto bohubilému účelu velmistrem Ing. Milanem Petrákem (Ústí nad Labem).
- Drahé kameny umístěné kolem zdroje záření X pochází zejména z dílny velmistra Františka Eichlera:

Křemen pochází z Žulové (Slezko) – dar dr. Františka Eichlera (Stráž pod Skalskem)

Amfibol pochází z Valeče (Doupovské vrchy) - dílo dr. Františka Eichlera

Kalcit je z rudných dolů na Slovensku – věnován dr. Tomášem Havlíkem

Pyrit pochází z uhelných dolů ve Vintířově u Chomutova

Komise Havlík, Petrák a Eichler se též jednomyslným prohlášením ustanovila způsobilou vydat návod k použití insignie.

Insignie - pravidla a způsob použití

§ 1 .

Insignie je nejvyšší symbol Krystalografické společnosti a vykonává funkci cechovního práva na věčné časy.

§ 2 .

Opatrovníkem, správcem a osobou odpovědnou za používání insignie je úřadující prezident společnosti. Je povinen insignii milovat, chránit před zneužitím a uchovávat na chladném a suchém místě.

§ 3 .

Členové Krystalografické společnosti jsou povinni prokázat insignii přiměřenou úctu a chránit ji před zneuctěním. Poctivý nálezce je za její na vrácení do rukou opatrovníka odměněn.

§ 4 .

Pro styk s insignií platí zvláštní pravidla:

- v okruhu 2 metrů je zakázáno požívat potraviny, nápoje a řešit národnostní problémy,
- je zakázáno líbat insignii na beryliová okénka,
- je zakázáno mechanicky narušovat vákuum insignie.

§ 5 .

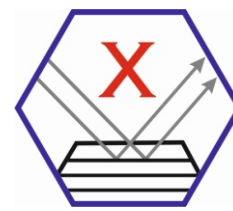
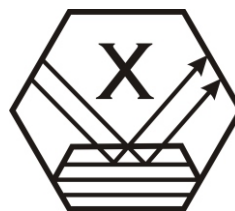
Tato pravidla platí na věčné časy, minimálně však na dobu jednoho roku. Mohou být změněna pouze při vyjí-

mečné příležitosti a to zvláštní komisí, která se prohlásí za způsobilou tyto změny provést.

Ve Vojtěchově u Hvozdu na Moravě dne 20.5.1992
Tomáš Havlík, František Eichler, Milan Petrák v.r.

Znak Krystalografické společnosti

Design znaku Krystalografické společnosti pochází z dílny proslulého mistra Zdenka Zikmunda, doktora přírodních věd, světově proslulého pracemi o symetrii fázových rozhraní. Znak Krystalografické společnosti byl vybrán na kolokviu v Malé Morávce na základě konkurzu vyhlášeného v lednu 1988. Vítěz konkurzu Z.Zikmund ve znaku zobrazil šestičetnou symetrii krystalů a difrakci rtg záření (X-Rays) na mřížových rovinách krystalu. Znak má mnoho zdařilých obměn k příležitosti významnějších konferencí z rukou R. Kužela a L. Dobiášové.



Vztah Krystalografické společnosti k mezinárodním organizacím

Z mezinárodního hlediska jsou důležité vztahy společnosti k Mezinárodní krystalografické unii (IUCr) a k Evropské krystalografické asociaci (ECA).

International Union for Crystallography (IUCr)

<https://www.iucr.org/>

Mezinárodní krystalografická unie (International Union of Crystallography - IUCr) vznikla v průběhu roku 1947 a byla přijata do Mezinárodní rady vědeckých unií (ICSU) dne 7.4.1947. Základní aktivity IUCr - vydávání časopisů, pořádání kongresů IUCr, práce komisí specializovaných na jednotlivé podobory krystalografie se plnohodnotně rozběhly již v roce 1948. Československo patří mezi pět zakládajících členů IUCr společně s USA, Velkou Británií, Norskem a Kanadou na prvním kongresu IUCr v roce 1948 v Bostonu díky a Prof. Františkovi Slavíkovi a Prof. Jiřímu Novákovi (řediteli Mineralogického ústavu PF UK v Praze). Československý národní komitét IUCr byl do IUCr přijat 16.10.1948. Členství Československého národního komitétu (NK) bylo původně financováno Radou vlády pro zahraniční styky a přes Přírodovědeckou fakultou Karlovy Univerzity. Po delších sporech zdali krystalografie patří pod mineralogii, hutnictví, fyziku a nebo chemii došlo k převedení komitétu pod fyzikální sekci ČSAV.

Z archivních materiálů dále vyplývá že po převedení NK do ČSAV od 11.11.1957 byla předsedou NK prof. Kochanovská. Od 27.10.1976 to byl prof. Garaj. V letech (1982-1991) předsedal NK dr. K. Huml, v letech (1992-1997) dr. M. Dunaj-Jurčo a potom dr. R. Kužel (1998-2001). Po rozdělení Československa nebyl Komitét rozdělen a skládá se nyní ze čtyř osob volených Vědeckou

radou Krystalografické společnosti a čtyři osob volených Odbornou skupinou chemie tuhé fáze Slovenské VTS.

První celosvětový kongres IUCr byl zorganizován 28.7.-3.8.1948 na Harvardské universitě v Bostonu na pozvání Americké krystalografické společnosti. Od té doby se kongresy IUCr navštěvované 2 až 4 tisíci účastníky opakují až do dnešní doby v pravidelných tříletých intervalech.

V roce 1948 IUCr vydávala pouze jediný časopis Acta Crystallographica. V současné době IUCr vydává celkem jedenáct časopisů označených Acta Crystallographica A, B, C, D, E, F specializovaných na jednotlivé podobory krystalografie, dále časopis Journal of Synchrotron Radiation, Journal of Applied Crystallography, IUCr data, IUCr Journal a Newsletter IUCr. Tištěné papírové vydání všech časopisů IUCr od roku 1948 zabírá v knihovně 15 metrů. Všechny časopisy jsou však nyní samozřejmě dostupné i v digitální formě.

V komisích IUCr pracovalo několik desítek lidí z ČR. Prof. R. Kužel pracoval po dvě volební období

v exekutivě IUCr a Krystalografická společnost pořádala Krystalografický Kongres IUCr v Praze v roce 2021.

European Crystallographic Association (ECA)
<https://ecanews.org/>

V letech kdy není kongres IUCr je od roku 1973 pořádána také Evropská krystalografická konference (European Crystallographic Meeting – ECA (<https://ecanews.org/meetings/>)). Evropská krystalografická asociace „European Crystallographic Association“ (ECA) byla založena až během sedmnácté ECM-17 konference v Lisabonu. **Konference ECM-18 pořádaná Krystalografickou společností v roce 1998 v Praze tedy byla první konferencí pod patronátem fungující Evropské krystalografické společnosti.**

V zájmových skupinách pracuje stále několik českých a slovenských krystalografů. K. Huml byl v minulosti 7 let prezidentem ECA. J. Hašek je řadu let v radě ECA a devět let byl auditorem ECA. R. Kužel byl v minulosti ve výkonném výboru ECA. V současné době pracuje ve výkonném výboru ECA Jan Dohnálek z BTU AV ČR.

Seznam vícedenních konferencí organizovaných Krystalografickou společností resp Odbornou skupinou před r. 1991

Structure of Organic Solids	16.-19.9.1968	Praha ÚMCH AVČR
1. Kolokvium – Mříž a souměrnost	4.- 6. 3.1969	Smolenice zámek
2. Kolokvium – Teorie difrakce	13.-16.10.1969	Velké Karlovice
3. Kolokvium – Matematické metody	20.-24.4.1970	Velké Karlovice
4. Kolokvium – Krystal vlastnosti	5.-9.10.1970	Velké Karlovice
5. Kolokvium – Rozptyl rtg a neutronů	5.-9.4.1971	Velké Karlovice
6. Kolokvium – OD struktury	29.5-2.6.1972	Chocerady
7. Kolokvium – Mřížové parametry	23-27.10.1972	Velké Karlovice
8. Kolokvium – FORTRAN	28.5-8.6.1973	Velké Karlovice
Inter. Summer School on Crystallographic Computing 28.7-5.9.1975 Aula VŠZ v Suchdole PRAHA		
9. Kolokvium - konference	1978	Modra, Slovensko
Řešení fázového problému	8.-11.9.1980	Visalaje
Experimentální techniky	5.-9.10.1981	Bechyně zámek
Kolokvium Krystalochem. silikátů	10.-11.4.1981	Stupava
Akt.problémy práškové difrakce	1982	Liptovský Mikuláš
Matematické metody I	26.-30.9.1983	Chlum u Třeboně
Výpočetní metody	18.-21.9.1984	ÚMCH AVČR Praha
Krystalografia a chemia silikátov II	2.-4.5.1984	Stupava
Aplikace strukturní analýzy	27.-31.5.1985	Lipno- Jenišov
Matematické metody II	19.-23.5.1986	Stará Lesná
Small angle scattering	13.-16.3.1987	ÚMCH AVČR Praha
AMEX – Advanced Methods	5.-9.10.1987	Karlovy Vary – Pupp
Krystalochemie a výzkum materiálů	3.-7.10.1988	Malá Morávka – Jeseníky
Výpočtové a experimentální metody	15.-19.5.1989	Stará lesná, Tatry
AMEX – Advanced Methods II	20.-24.8.1990	Pyramida Praha
Matematické metody III	27.-31.5.1991	Herlany, Slovensko
Reálná struktura látek	18.-23.5.1992	Vojtěchov



Experimentální techniky	6.-10.6.1994	Ostrava VŠB
Size-Strain	August 1995	Liptovský Mikuláš
Metody studia struktury látek	24.-28.6.1996	Staré Hamry, Beskydy
Struktura a funkce biol.materiálů+PSP1	10.-12.6.1997	Praha ÚMCH AV ČR
European Crystallographic Meeting-18 15.-20.8.1998		Praha ČVUT
Struktura 1999 + PSP3	14.-18.6.1999	Hodonín u Kunštátu
Struktura 2001 + PSP4	18.-22.6.2001	Bedřichov, Fortuna
Experimentální metody 2002	17.-21.6.2002	Ostravice
Výpočetní metody 2003 + PSP5	16.-20.6.2003	Nové Hrady, zámek
EPDIC-9	2.-5.9.2004	Praha, ČVUT
7th XTOP	7.-10.9.2004	Průhonice
Struktura 2005 + PSP6	20.-23.6.2005	Třeš•
Synchrotron. radiation + Neutron scatt.	21.-25.6.2006	Grenoble
Struktura 2007 + PSP7	18.-21.6.2007	Dvůr Králové
Struktura 2008 + RPKD	16.-20.6.2008	Valtice
Struktura 2009 + PSP8	22.-25.6.2009	Hluboká nad Vltavou
Struktura 2010	14.-18.6.2010	Soláň
Struktura 2011 + PSP9	20.-23.6.2011	Turnov
Struktura 2012 výpočetní metody	11.-14.6.2012	Klatovy
Struktura 2013 + PSP10	9.-13.9.2013	Češkovice
Struktura 2014	9.-12.6.2014	Kutná Hora
Struktura 2015 + PSP11	22.-25.6.2015	Luhačovice
Aperiodic 2015	30.8-4.9.2015	Praha, Břevnovský klášter
ICCBM-16 Crystal.Biol.Molecules	2.-7.7.2016	Praha, Pyramida
8th XTOP 2016	4.- 8.9.2016	Brno, kino Scala
Struktura 2016	12.-15.9.2016	Tábor
Struktura 2017 + PSP12	19.-22.6.2017	Telč
Struktura 2018	18.-21.6.2018	Harrachov
Struktura 2019 + PSP13	10.-13.6.2019	Ždár nad Sázavou
Struktura 2020 + PSP14	25.-27.11.2020	online (Praha, MFF)
25th Gen.Assembly & Congress of IUCr 14.-21.8.2021		Praha KCP - hybridní
Struktura 2022 + PSP15	20.-24.6.2022	Tábor
5.School on Aperiodic Crystals	23.-27. 5.2022	Kutná Hora
HEC-24	22.-24.10.2022	Lipno, Dolní Vltavice

Tučně jsou vytištěny mezinárodní konference

Zkratky:

AMEX = Advanced Methods in X-ray analysis

PSP = přehlídka PhD a studentských prací v oboru krystalografie (první dvě organizovala FJFI)

XTOP = X-ray topography and high-resolution diffraction

EPDIC = European Powder Diffraction Conference

RPDK = Regionální Powder Diffraction Conference

HEC = Heart Europe Bio-Crystallography Meeting

(mezinárodní přehlídka PhD studentských prací z oboru strukturní biologie)

IUCr = International Union for Crystallography – member of ICSU

KCP = Prague Congress Centre

ICCBM = International Conference for Crystallization of Biological Molecules

Výše uvedený seznam konferencí se týká pouze některých z 81 vícedenních akcí.

Jednodenních seminářů uspořádala Krystalografická společnost do roku 2023 celkem 307.

Jejich seznam je na WERB stránkách společnosti od roku 1995.

Programy Rozhovorů od roku 1953 do 1994 jsou dostupné pouze v tištěné formě na papíru v archivu Společnosti.

L2

CRYSTALLOGRAPHY AT THE CZECH GEOLOGICAL SURVEY

F. Laufek

Czech Geological Survey, Geologická 6, 152 00 Prague 5, Czech Republic

frantisek.laufek@geology.cz

The task of the Czech Geological Survey, established in 1919, is to provide the state geological service for the Czech Republic and to perform research in geosciences and related scientific disciplines. The Czech Geological Survey (formerly Czech Geological Institute) has the statutory responsibility to gather, store and interpret geological information so that the state administration can take appropriate decisions about national economic and environmental issues. Laboratory of X-ray Diffraction of the Czech Geological Survey has long history and today it is a part of a Department of Rock Geochemistry.

Laboratory is equipped by two powder diffractometers Philips XPert and Bruker D8 Advance. The latter is equipped with Cu and Co X-ray tubes, Lynx Eye-XE detector, motorized XYZ translation stage, option of automatic loading of samples (Flip-Stick for 9 samples) and parabolic Göbel mirror for Cu radiation. Mill McCrone is

used for standard milling of powder samples. Part of the Laboratory is a workshop for separation of clay fraction (fraction below 2 μm), preparation of oriented specimen and subsequent specific treatment of prepared specimens. The main activities of the Laboratory can be divided in three groups:

- 1) The routine (quantitative) phase analysis of various samples including rocks, drill cores, separated minerals, heavy mineral concentrates, synthetic products.
- 2) Separation and subsequent mineralogical analysis of clay fraction
- 3) Refinement and solution of crystal structures of minerals and synthetic phases containing platinum-group elements (in collaboration with Institute of Physics, Prague).

L3

RENTGENOVÁ DIFRAKCE A ELEKTRONOVÁ MIKROANALÝZA V ODDĚLENÍ ANALYTICKÝCH METOD GEOLOGICKÉHO ÚSTAVU AVČR

R. Skála, Z. Korbelová, M. Š astný

*Geologický ústav Akademie věd České republiky, v. v. i., Rozvojová 269, 16500 Praha 6 – Lysolaje
skala@gli.cas.cz*

Historie do r. 2009

Geologický ústav Akademie věd České republiky, v. v. i. prošel spletitým vývojem zahrnujícím četná slučování s jinými akademickými geovědními instituty a opětná oddělování z nich nebo reorganizace v rámci existujících ústavů. Geologický ústav ČSAV (GÚ) byl založen 1. 7. 1960 sloučením laboratoří paleontologie, inženýrské geologie a pedologie, vzniklých v r. 1953 jako specializovaná vědecko-výzkumná pracoviště (laboratoře) pro vybrané dílčí obory geologických věd v rámci Československé akademie věd (ČSAV), která jako taková byla konstituována v roce 1952. Paralelně z laboratoře geochemie vznikl Ústav geochemie a nerostných surovin ČSAV (ÚGNS). V roce 1964 proběhla reorganizace GÚ ČSAV se začleněním části pracovníků ÚGNS ČSAV. V polovině roku 1969 byl vytvořen Ústav experimentální mineralogie a geochemie ČSAV (ÚEMG) delimitací části pracovníků GÚ ČSAV. Ke konci roku 1978 byla působnost ÚEMG ČSAV ukončena a pracovníci byli opětně začleněni do GÚ ČSAV. Život GÚ byl však doslova jepičí, již po dvou měsících byl zrušen a začleněn do Hornického ústavu ČSAV (HÚ) za vzniku Ústavu geologie a geotechniky ČSAV (ÚGG). Po Sametové revoluci byl ÚGG ČSAV zru-

šen (28. 2. 1990) a Geologický ústav ČSAV (GLÚ) byl znovu zřízen s účinností od 1. 3. 1990 jako státní rozpočtová organizace. A nakonec, od 1. 1. 2007 se GLÚ stává veřejnou výzkumnou institucí.

Podobně jako s celým ústavem to bylo i s Oddělením analytických metod. Například právě dnešní laboratoř rentgenové difrakce jako součást oddělení mineralogie postupně a v různých podobách cestovala takřka po celé Praze. Po krátkém exilu na Přírodovědecké fakultě UK byla v roce 1961 dislokována do druhého patra budovy v Chotkově ulici č. 4 („Domov řeckých uprchlíků“) odkud se v roce 1965 přestěhovala do Mánesovy ulice č. 74. V té době bylo významnou náplní zejména strukturální studium jílových minerálů. K slovnosti laboratoře tehdy přispěli především Prof. RNDr. Zdeněk Johan, CSc. a RNDr. Ervín Slánský, CSc., spoluautoři (společně s Robertem Rotterem) knihy *Analýza látek rentgenovými paprsky* (SNTL - Nakladatelství technické literatury, Praha (1970) 257 s.). Vyvrcholením tohoto vývoje pak byla emigrace většiny pracovníků oddělení mineralogie po srpnových událostech 1968, což vyústilo v jeho zrušení a převedení rentgenové laboratoře do Lysolají. To je zároveň moment, kdy



oddělení nabylo dnešních obrysů za vzniku Laboratoře fyzikálních metod.

Na pracoviště v Praze–Lysolajích, které bylo přebudováno z jednopatrové budovy bývalého skladu (Obr. 1a), se přestěhoval mimo rentgen-difrakční instrumentace i transmisní elektronový mikroskop Tesla. O tři roky později (1972) byly ústavu přiděleny finanční prostředky (1,5 milionu Kčs) na koupi elektronového mikroanalýzátoru (EPMA) od japonské firmy JEOL. K této události se pojí z našeho současného pohledu úsměvná historika – akademik Vladimír Zoubek, který se o přidělení financí zasadil, si je pojistil tím, že hned po vyrozumění o kladném vyřízení žádosti dal zprávu o této události do deníku Večerní Praha. Přístroj JEOL JXA 50A byl uveden do provozu v únoru 1973. Mgr. Karel Jurek, CSc. vybudoval v Ústavu experimentální mineralogie a geochemie na svou dobu moderní laboratoř, stal se jejím vedoucím a byl jím až do roku 1980, kdy odešel do Ústavu fyziky pevných látek (dnešní Fyzikální ústav AVČR, v. v. i.). Hovoříme-li o Karlu Jurkovi, nelze nezmínit knihu, kterou společně napsali s doc. Ing. Václavem Hulínským, CSc. z VŠCHT (*Zkoumání látek elektronovým paprskem*. SNTL - Nakladatelství technické literatury, Praha (1982) 401 s.). Mezi lety 1980 a 1986 pracoviště vedl Ing. Jan Blahoslav Kolman. Od roku 1986 se ve vedení laboratoře střídali Ing. Drahoš Rykl, CSc., RNDr. František Pechar, CSc. a Ing. Pavel Podracký, CSc. V roce 1990 se vedení laboratoře ujala Ing. Anna Langrová. V témže roce byl pořízen nový EDS analyzátor EDAX. Od poloviny roku 1994 po odstranění spektrometrů byl JEOL JXA 50A využíván jako elektronový mikroskop s EDS analyzátozem (Obr. 2a). V roce 2009 byl provoz ukončen a přístroj rozebrán. Na místě operátorů se



Obrázek 2. Elektronový mikroanalýzátor JEOL JXA 50A v „odstrojené podobě“ fungoval mezi lety 1994 a 2009 jako rastrovací elektronový mikroskop s ED spektrometrem EDAX (a). V roce 2010 byl nahrazen SEM TESCAN VEGA3 XMU (b). Foto: Z. Korbelová (a) a R. Skála (b).



Obrázek 1. Historická (dnes již neexistující (a)) a nová (b) budova Geologického ústavu, kde sídlí Oddělení analytických metod. Foto: M. Filippi.

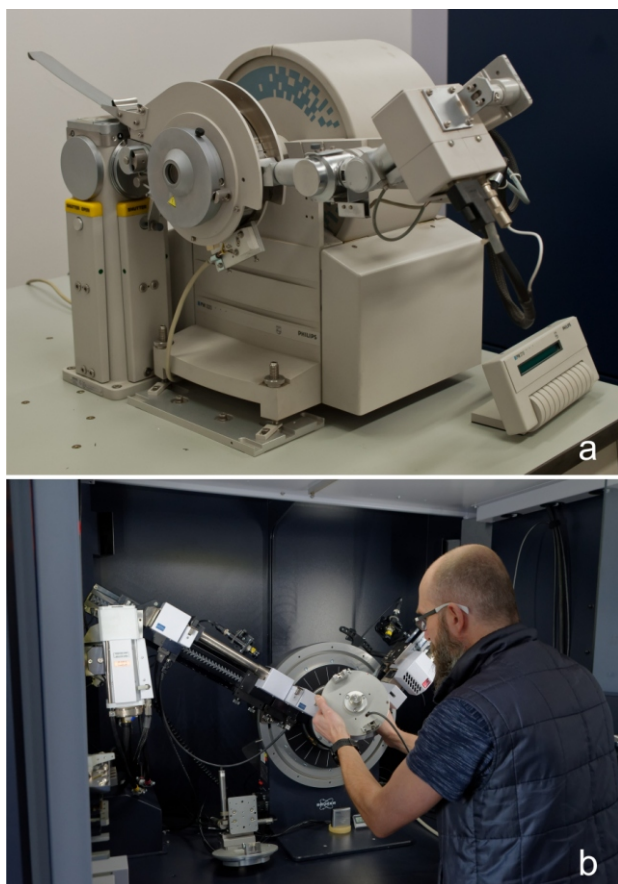
v období od pořízení elektronového mikroanalýzátoru až do r. 1990 mimo již zmíněných vystřídali M. Kučerová, M. Kozumplíková, p.ch. L. Megarskaja, CSc., H. Součková, a p.g. L. Thin.

Příprava vzorků pro měření pomocí EPMA a SEM obvykle vyžaduje pokrytí jejich povrchu vodivou vrstvou uhlíku nebo kovu, a proto provázejí historii laboratoře systémy na vakuové napařování uhlíku a iontové napařování kovu. Nejstarší systém z roku 1968, který je v současné době stále v provozu a slouží k depozici vrstvy zlata na povrch objektů, je systém Carl Zeiss HBA 1. V roce 1976 k němu přibyl přístroj firmy VEB Hochvakuum Dresden B30.

Kvantitativní chemická mikroanalýza pomocí EPMA se obvykle realizuje na leštěných rovinných površích – typicky se připravují tzv. leštěné výbrusy nebo leštěné nábrusy. Pro přípravu těchto preparátů vznikla na pracovišti brusárna. V brusárně byly instalovány pily a brusky Struers Discoplan TS (2005), Montasupal (1977), a lešticí stroje Struers Planopol-3 (1989), Kent Mark II (1970) a MTH APX-010 s MTH KOMPAKT-1031 (2005).

Rentgenová difrakce se přístrojově postupně opírala o práškové filmové difrakční komory včetně komory Guinierovy pro studium jílových minerálů a práškový difrakto-

metr DRON (získán v r. 1979). K dispozici byly i monokrystalové komory, např. precесní komora STOE. V roce 1997 dochází k významnému kvalitativnímu posunu nákupem práškového rtg. difraktometru Philips X³Pert (s generátorem PW 1830 řídicí jednotkou PW 3710 MPD a goniometrem PW 3020) vybaveného sekundárním grafitovým monochromátorem a proporcionálním bodovým detektorem (**Obr. 3a**). Mezi pracovníky, kteří v tomto období do laboratoře rentgenové difrakce patřili, jsou RNDr. Alexej Ždimera, Ing. Jiří Obrda, RNDr. František Pechar, CSc., Jiří Dobrovolný nebo RNDr. Karel Melka, CSc.



Obrázek 3. Práškový rtg. difraktometr Philips používaný mezi lety 1997a 2012 (a). Instalace stolku pro kapilární transmisí na goniometr Bruker D8 (b). Foto: R.Skála.

V roce 2002 byl do oddělení zakoupen elektronový mikroanalýzátor (EPMA) CAMECA SX-100 (**Obr. 4a**). Přístroj byl vybaven čtyřmi vlnově disperzními krystalovými spektrometry s celkově 12 analytickými krystaly. Rozsah analyzovatelných prvků byl od B do U. K zobrazení studovaných vzorků se používaly detektory zpětně odražených elektronů (BSE) a sekundárních elektronů (SE).

Náplň práce laboratoře byla velmi diversifikovaná. Hlavní součástí byl vědecký servis pro ostatní vědecká oddělení GLÚ, ale také poskytování analytických služeb dalším akademickým ústavům, vysokým školám nebo i komerčním subjektům. Mezi ty zajímavější práce patřilo studium minerálních fází a zejména struktur hornin ze zrnek a prachu regolitu ze sovětských lunárních sond Luna. Na první pohled méně atraktivní, nicméně důležitý, byl

výzkum křídových a terciálních sedimentů (projekt KOHHINOOR) a struktur zeolitů.

Doba moderní (od r. 2009)

V říjnu 2007 byla zahájena stavba nové budovy GLÚ (**Obr. 1b**). Dne 18. 8. 2009 proběhla její kolaudace a stará hlavní budova byla k 31. 8. 2009 vystěhována. Po tomto datu můžeme s ohledem na skutečnost následující postupně akvizice 5 nových analytických přístrojů hovořit o přechodu pracoviště do „doby moderní“. Z Laboratoře fyzikálních metod a později Laboratoře analytických metod (2011-12) resp. Laboratoře analytických metod a fyzikálních vlastností hornin (2013-14) se v r. 2015 stalo Oddělení analytických metod s laboratořemi rentgenové difrakce, elektronové mikroanalýzy, Ramanovy a infračervené spektroskopie a brusírnou.

Laboratoř rentgenové práškové difrakce

V době masivního nástupu pozičně citlivých detektorů stávající difraktometr Philips nezadržitelně morálně zastarával. Vystala tak potřeba jeho nahrazení novým, modernějším přístrojem.

V prosinci 2011 byl nainstalován práškový rentgenový difraktometr Bruker D8 DISCOVER v Bragg-Brentanově geometrii (**Obr. 3b**). Přístroj je vybaven primárním fokusačním monochromátorem Johanssonova typu a pozičně citlivým lineárním detektorem LynxEye. Difraktometr umožňující sběr dat v reflexním uspořádání, ve foliové transmisí i v kapiláře. Difraktometr je dále možno přestavět na běžné Bragg-Brentanovo uspořádání bez dalších optických členů. Také je možné mikrodifrakční uspořádání s polykapilární optikou a kolimátory o průměrech svazku 100, 300, 500 μm a 1 mm s motorizovaným X-Y-Z stolkem a rotací vzorku podle osy Z.

Základní správa a vyhodnocení záznamů je prováděno softwarem DIFFRAC.EVA, který také slouží pro kvalitativní a semi-kvantitativní fázovou analýzu a případně pro hrubý odhad mikrostrukturních parametrů. Pro identifikaci fází byla původně používána databáze ICDD PDF-2 ve verzi z r. 2011 dodaná s difraktometrem. V r. 2020 byla pořízena databáze ICDD PDF-4 Axiom 2020 obsahující záznamy odpovídající převážně standardním laboratorním podmínkám, což zcela vyhovuje profilu pracoviště. Na pracovišti se zabýváme rovněž strukturálními zpřesněními a kvantitativní fázovou analýzou, pro které používáme především software DIFFRAC.TOPAS, ačkoliv v některých případech nacházejí uplatnění i programy FullProf, JANA a GSAS-II, které jsme používali před pořízením difraktometru Bruker.

Do této doby spadá i vznik mimořádně ceněné knihy *Encyklopedický přehled jílových a příbuzných materiálů*, vydané v r. 2014 nakladatelstvím Academia Praha, jejímiž autory jsou RNDr. Karel Melka, CSc. (*1930-†2015), emeritní pracovník oddělení, a RNDr. Martin Šťastný, CSc, rovněž zaměstnanec GLÚ.

V nové budově se provoz laboratoře pojí se jmény RNDr. R. Skály, Ph.D., Mgr. A. Kallistové, Ph.D. a Mgr. P. Mikyska, Ph.D.



Laboratoř elektronové mikroanalýzy (a brusírna)

Laboratoř je aktuálně vybavena rastrovacím elektronovým mikroskopem (SEM) TESCAN VEGA3 XMU (**Obr. 2b**) pořízeným v r. 2010. Jedná se o mikroskop s termionickým wolframovým zdrojem a možností práce v nízkém vakuu. Velká komora nejen umožňuje práci s relativně velkými vzorky, ale navíc poskytuje i dostatečný počet portů pro instalaci detektorů. V současnosti (květen 2023) je SEM osazen pro účely zobrazování detektory zpětně odražených elektronů (BSE), sekundárních elektronů (SE) Everhart-Thornleyho typu, dále detektorem sekundárních elektronů v nízkém vakuu (LVSTD). Schopnost práce v nízkém vakuu dovoluje zobrazování a částečně i analýzu vzorků, aniž by byly zvodivěny. To v oblasti nejen geologických věd v případě, kdy není z jakýchkoliv důvodů předmět vhodné nebo dokonce možné ovlivnit depozicí např. uhlíku nebo zlata, představuje důležitou funkci. Pro chemickou mikroanalýzu je SEM vybaven energiově disperzním rtg. spektrometrem (EDS) Oxford Ultim Max 65. Tento spektrometr v roce 2020 nahradil původní detektor Bruker QUANTAX 200.

Do nové budovy byla odstěhována kromě rentgenového difraktometru Philips i elektronová mikrosonda. Ta byla v roce 2015 rozšířena o ED rtg. spektrometr Bruker X-Flash 5010 pro rychlé ověřování složení. S přibývajícím stářím se ovšem píše o tento klíčový přístroj stávala ekonomicky neudržitelnou. Vyvstala tedy potřeba jeho nahrazení.



Obrázek 4. Elektronový mikroanalýzátor CAMECA SX-100 provozovaný v letech 2002 až 2019 (a) a jeho nástupce JEOL JXA-8230 Superprobe (b). Foto: R.Skála.

Nejnovější přírůstek do přístrojového parku oddělení tak představuje elektronový mikroanalýzátor JEOL JXA-8230 (**Obr. 4b**) pořízený v roce 2019. Umožňuje alternativně využívat W anebo LaB₆ zdroj elektronů. Je vybavený pěti vlnově disperzními krystalovými spektrometry nesoucími celkem 14 analytických krystalů. Přístroj umožňuje analýzu prvků od B do U. K zobrazení studovaných vzorků se používají BSE, SE a panchromatické CL detektory. Pro rychlý screening složení je EPMA vybavena ED rentgenovým spektrometrem.

„Muzejní sbírku“ přístrojů určených ke zvodivění preparátů pro analýzu SEM nebo EPMA, které byly do nové budovy nastěhovány ze staré laboratoře, v roce 2014 upgradoval kombinovaný systém s výměnnými vložkami pro vakuové napařování uhlíku nebo iontové napařování kovu Q150T ES britské firmy Quorum Technologies Ltd.

Drobného upgradu (2017) se dočkala i brusírna, kam byl zakoupen přístroj Buehler PetroThin pro výrobu leštěných výbrusů k doplnění stávajícího vybavení.

Na místě operátorů SEM/EPMA v novém období pracovali nebo pracují (v abecedním pořadí): Ing. A. Langrová, RNDr. Z. Korbelová, Ing. Š. Křížová, Ph.D., Mgr. N. Mészárosová, Ing. V. Mocová, Ph.D., RNDr. E. Pecková, Ph.D. O chod brusírny se stará J. Jabůrková.

Laboratoř Ramanovy a infračervené spektroskopie

Jako komplementární techniky k rtg. difrakci resp. elektronové mikroanalýze jsou v oddělení používány metody vibrační spektroskopie.

Ramanův mikrospektrometr S&I MonoVista CRS+ (zakoupen v roce 2015) je vystaven na mikroskopu Olympus BX-51 WI, spektrometru Princeton Instruments SpectraPro SP2750 (ohnisková vzdálenost 750 mm a clonové číslo f/9,7) a CCD detektoru ANDOR iDus 416 s 2000 × 256 pixelů (velikost pixelu 15 μm). Excitační lasery mají vlnové délky 488 nm, 532 nm a 785 nm. Mikroskop je určen pro pozorování vzorků v odraženém nebo procházejícím světle; k dispozici je možnost polarizace. Na mikroskopu jsou instalovány objektivy: 4×, 10×, 50×, 50× LWD, 100× a 100× LVD. Vzorky jsou umístěny na počítačově řízeném motorizovaném stolku. Prostorové rozlišení s objektivem 100× je 1 μm laterálně a 2 μm axiálně. Systém umožňuje sběr spekter v rozsahu 60–9300 cm⁻¹ s excitačními lasery 488 nm a 532 nm a 60–3500 cm⁻¹ s excitačním laserem 785 nm. Spektrální rozlišení je lepší než 1,0 cm⁻¹ pro mřížku s hustotou 1800 vr/mm a excitační laser 532 nm a 0,65 cm⁻¹ pro mřížku s hustotou 1200 vr/mm a excitační laser 785 nm.

V roce 2017 byl pořízen infračervený spektrometr s Fourierovou transformací (FTIR) Thermo Scientific Nicolet iS-50 s vestavěným příslušenstvím pro střední a vzdálené infračervené záření a nástavcem pro techniku zeslabeného úplného odrazu (ATR) s diamantovým krystalem. Spektrometr je vybaven keramickým zdrojem infračerveného záření (9600 – 50 cm⁻¹) a detektorem DLATGS s KBr okénkem. V transmisním uspořádání pokrývá spektrometr rozsah vlnočtů 7800 – 350 cm⁻¹. V režimu ATR jsou pokryta vlnočty 4 000 – 100 cm⁻¹ v závislosti na použitém děliči svazku.

Současná náplň práce oddělení

Oddělení v průběhu své existence začalo spolupracovat s mnoha dalšími ústavu Akademie věd (např. Archeologickým ústavem, v.v.i., Geofyzikálním ústavem, v.v.i., Ústavem fotoniky a elektroniky, v.v.i., Ústavem chemických procesů, v.v.i., Ústavem struktury a mechaniky hornin, v.v.i., Ústavem teoretické a aplikované mechaniky, v.v.i.), s vysokými školami (např. s Přírodovědeckou fakultou Univerzity Karlovy, Katolickou teologickou fakultou Univerzity Karlovy, Českou zemědělskou univerzitou, Vysokou školou chemicko-technologickou, Jihočeskou univerzitou), se státními institucemi (např. Českou geologickou službou, Národním galerií, Národním muzeem, Národním památkovým ústavem, Generálním ředitelstvím cel) i s průmyslovými subjekty (např. Preciosou a. s., Balakomem a. s., Safinou a. s.).

L4

RTG DIFRAKČNÍ A SPEKTROSKOPICKÉ METODY V MATERIÁLOVÉM VÝZKUMU NA UNIVERZITĚ PALACKÉHO V OLOMOUCI

J. Filip

*Regionální Centrum Pokročilých Technologii a Materiálů, Český institut výzkumu a pokročilých technologií (CATRIN), Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Česká republika
jan.filip@upol.cz*

Historický přehled použití RTG difrakčních metod pro výzkum na půdě Univerzity Palackého v Olomouci, zejména na Katedře anorganické chemie (Přírodovědecká fakulta), přibližně do roku 2000 byl v minulosti publikován v práci Krausové et al. [1]. Další vývoj využití RTG technik v rámci tehdejšího pracoviště Centra výzkumu nanomateriálů (Přírodovědecká fakulta) pro výzkum zejména nanomateriálů byl následně shrnut v práci Filipa [2], kde byla zdůrazněna zejména měření pomocí vysokoteplotní RTG práškové difrakce. Nové směry výzkumu na navazujícím pracovišti (Regionální Centrum Pokročilých Technologii a Materiálů, jakožto materiálově zaměřené součásti Českého institutu výzkumu a pokročilých technologií CATRIN Univerzity Palackého v Olomouci) jsou taktéž úzce spjaty s RTG difrakčními metodami, kdy v rámci (nano)materiálového výzkumu jsou nové difraktometry využívány k rutinní kvalitativní a kvantitativní fázové analýze jak suchých práškových vzorků, dále nanomateriálů ve vodných suspenzích a k analýze tenkých filmů. Tyto difraktometry jsou vybaveny vysokoteplotními (reakčními) komorami, které umožňují *in-situ* monitorování reakcí v pevné fázi, reakcí typu pevná fáze/plyn a strukturních vlastností materiálů od pokojové teploty až do 900/1200 °C a tlaku plynů 1 mbar až 10 barů (inertní, oxidační, redukční a nejrůznější reakční plyny a různé relativní vlhkosti vzduchu). Další specifickou nástavbou je měření v režimu malouhlového rozptylu RTG záření SAXS (kompletně vakuovaná cesta v komoře ScatterX78, popř. realizace měření SAXS v kapiláře umístěné v komoře HTK16, umožňující ohřev až do 1200 °C). V rámci výzkumné skupiny „Biologicky aktivní komplexy a molekulové magnety“, vedené prof. Z. Trávníčkem, je pro určení molekulových a krystalových struktur nově připra-

Mimo to ale pracovníci oddělení běžně provádějí i výzkum vlastní. Byla tak např. studována mikrostruktura biogenního apatitu zubní skloviny, aspekty mikrostruktury některých minerálů aplikovatelné pro otázky ukládání radioaktivního odpadu, struktury minerálů včetně popisu nových druhů, chemismus tektitů včetně vltavínů, strukturní aspekty meteoritických sulfidů a jejich syntetických analogů.

Naše poděkování patří Mgr. Karlu Jurkovi, CSc., Mileně Kozumplíkové, Ing. Anně Langrové a doc. RNDr. Jaromíru Ulrychovi, DrSc. za příspěví při rekonstrukci dějů minulých. Provoz oddělení je financován především z prostředků výzkumného plánu RVO 67985831 Geologického ústavu AVČR.

vovaných protinádorově či protizánětlivě účinných koordinačních sloučenin, případně komplexů vykazujících zajímavé magnetické vlastnosti, využíván monokrystalový RTG difraktometr D8 Quest (Bruker). Z dalších technik, využívajících RTG záření, je nutné zmínit RTG fotoelektronovou spektroskopii a RTG fluorescenční spektroskopii, které jsou dostupné v různých variantách na různých pracovištích v rámci Univerzity Palackého v Olomouci.

Tyto zmíněné přístroje jsou zahrnuty do poměrně komplexního přístrojového parku pokrývajícího nejrůznější aspekty (nano)materiálového výzkumu (viz např. [3]). Kompletní přehled nejenom RTG difrakčních metod, ale všech zařízení pro materiálový výzkum využívajících RTG záření, zahrnuje na Univerzitě Palackého v Olomouci:

Práškové difraktometry: X'Pert PRO MPD (Malvern Panalytical), Empyrean (Malvern Panalytical), D8 Advance (Bruker) - 2x Stolní práškové difraktometry: Aeris (Malvern Panalytical), MiniFlex600 (Rigaku)
Monokrystalové difraktometry: D8 Quest (Bruker), XtaLAB Synergy-i (Rigaku), Xcalibur2 (Oxford)
RTG fotoelektronové spektrometry: Nexsa G2 (ThermoFisher Scientific), VersaProbe II (ULVAC-PHI)
Vlnově disperzní RTG fluorescenční spektrometr: S4 PIONEER (Bruker).

Ruční RTG fluorescenční spektrometry: Delta Professional (Olympus Innov-X) - 2x, Vanta (Olympus).

1. D. Krausová, J. Kameníček, Z. Trávníček, J. Walla, *Materials Structure*, **8**(2), (2001), 67-73.
2. J. Filip, *Materials Structure*, **17**(2a), (2010), k64.
3. <https://www.rcptm.com/business/analytic-services/>.