



KRYSTALOGRAFIE A KRYSTALOGRAFOVÉ V ČESKÉ A SLOVENSKÉ REPUBLICE

Krystalografie v materiálovém výzkumu, aplikovaná krystalografie, krystalografie ve fyzice

Historie krystalografie v Československu byla od počátku spojena z větší části s materiálovým výzkumem a také se Škodovými závody. V současné době je se jménem **Škoda** spojena automobilka v Mladé Boleslavi, kde se používá rtg difrakce pro výstupní kontrolu částí převodovek, přesněji pro kontrolu profilů tlakových napětí, které se zavádí do materiálu pomocí balotínování (kuličkování). Ve **Škodě Plzeň** byla využívána difrakce dlouhou dobu s jednoduchými přístroji a filmovou registrací. Nyní jsou v Plzni především dvě pracoviště vybavené novými difraktometry ve [výzkumném centru Západočeské univerzity - Nové technologie](#) (oddělení Materiály a technologie - P. Šutta, J. Fiala), kde se výzkumné aktivity soustřeďují v současnosti na výzkum a vývoj materiálů pro fotovoltaické články II. a III. generace, materiálů pro fotoniku a mikrosystémovou techniku. Zejména tenké vrstvy transparentních vodivých oxidů a tenké vrstvy křemíku různých strukturních modifikací. Laboratoř je vybavena moderními difraktometry, včetně jednoho s 2D detektorem. Dále pak laboratoř na [katedře fyziky](#) Fakulty aplikovaných věd (R. Čerstvý), zaměřené na charakterizaci tenkých vrstev.



Pavel Šutta

Martin Černík

Rtg laboratoře nalezneme v různých podnicích, např. cementárnách. Dlouho dobu je také v [Precheze](#) Přerov (J. Balcárek), která patří k největším producentům anorganických barviv v České republice a jednomu ze tří největších výrobců kysličníku titaničitého v zemích CEFTA.

Rtg analýza má tradici i v [U. S. Steel](#) v **Košicích** a to zejména podrobná analýza textur (M. Černík) [1]. Laboratoř je v současnosti pro tento účel velmi dobře vybavena difraktometrem pro měření textur a napětí a polohově citlivým detektorem, softwarem MulTex, LaboTex, MAUD a také metodou EBSD (electron back-scattered diffraction). Zaměřuje se na analýzu válcovaných plechů, povlaků, keramik, sedimentů, prachů atd.

Materiálový výzkum je v posledních letech intenzivně vyvíjen na [Ústavu materiálů](#), Materiálovětechnologické fakultě Slovenské univerzity v Bratislavě, která sídlí v **Trnavě** (L. Čaplovič, M. Kusý) [2]. Laboratoř vznikla v roce 1986. Nyní je dobře vybavena zejména pro metody elektronové mikroskopie a difrakce. Výzkumná činnost se zaměřuje na oblast komplexních kovových slitin, korozní odolnost austenitických nerezových ocelí, bezolovnatých



Miroslav Kusý (vlevo)

Eubomír Čaplovič (nahore)

pájek, nástrojových ocelí připravených metodami práškové metalurgie a zařízení pro jadernou energetiku.

Dlouhou historii má materiálový výzkum na [katedře inženýrství pevných látek](#) Fakulty jaderné a fyzikálně inženýrské ČVUT v Praze (N. Ganev, S. Vratislav, I. Kraus, K. Kolařík, Z. Pala) [3]. Pracoviště získalo výbornou reputaci zejména v oblasti rentgenové tenzometrie včetně analýzy hloubkových profilů makro- a mikronapětí vznikajících v důsledku různých způsobů opracování materiálů a povrchových úprav. Katedra má i pracoviště neutronového zdroje v Řeži u Prahy, kde se věnuje studiu textur, magnetických materiálů a fázových transformací, kontrole technologických procesů v chemické katalýze.



Nikolaj Ganev



Zdeněk Pala

Kamil Kolařík

Na pracovišti [VUT Brno](#) má prášková difrakce dlouholetou tradici při vývoji pokročilé keramiky pro lékařské účely stejně jako ve spolupráci s průmyslem. Rtg pracoviště je i na [Ústavu fyziky materiálů](#) AVČR v.v.i. (Y. Jirásková, B. David, O. Schneeweiss), kde je studován vliv



Jan Filip



Pavla Roupcová



Václav Holý



Zdeněk Matěj

struktury materiálů na jeho magnetické chování u nanokrystalických materiálů na bázi železa, jak pomocí Mössbauerovy spektroskopie, tak i rtg difrakcí a transmisní elektronové mikroskopii. Na obou pracovištích se stará o rtg difrakci P. Roupcová.

Populární nanomateriály jsou studovány na řadě pracovišť. Přímě zaměřeno na tyto materiály je např. [Centrum nanotechnologií](#) na Vysoké škole báňské - Technické univerzitě Ostrava (M. Valášková, G. Simha Martynková), kde jsou připravovány a studovány materiály na bázi modifikovaných anorganických vrstevnatých struktur (silikáty, hydroxidy), frikční kompozity s uhlíkatou složkou a nanokompozity, nanokeramiky. A také [Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů](#) při Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého v Olomouci (R. Zbořil), kde skupina kovových nanomateriálů (J. Filip) pracuje na výzkumu nanokrystalických kovů zejména na bázi železa a vzácných kovů (např. použití nanoželeza v in situ technologiích čištění podzemních vod), dále použití nanostříbra v antimikrobiálních technologiích a aplikace nanočástic kovů v katalýze. V oblasti základního výzkumu se skupina věnuje komplexnímu popisu toxicity nanokovů, mechanismu antibakteriálního účinku nanostříbra nebo mechanismu interakce nanoželeza s vybranými polutanty [4].

Velmi nedávno vznikl [Ústav pro nanomateriály, pokročilé technologie a inovace](#) na **Technické univerzitě v Liberci** a v jeho rámci Laboratoř aplikované strukturní rentgenografie s novým přenosným difraktometrem (N. Ganev).

Na pomezí fyziky a materiálové vědy se pohybuje několik pracovišť. Např. [katedra fyziky kondenzovaných látek](#) na **Matematicko-fyzikální fakultě UK** v Praze. Skupina strukturní analýzy (V. Holý, R. Kužel, S. Daniš, M. Dopita, Z. Matěj) se věnuje se poměrně široké problematice - komplexní rtg analýze nanokrystalických tenkých vrstev a prášků, jejich krystalizaci a in-situ difrakčnímu studiu jejich teplotní stability. Obdobným studiím mikrokrytalickým materiálů získaných intenzivní plastickou deformací. Dále nanotrúbkám, silně orientovaným a epitaxním vrstvám. Byly studovány např. polovodičové epitaxní vrstvy s magnetickými inkluzemi, difuzní rozptyl na dislokacích v relaxovaných epitaxních vrstvách GaN, rozptyl na magnetických polovodičových feromagnetických vrstvách GaMnAs, na polovodičových nanokrystalech a procesy samouspořádání polovodičových kvantových teček v epitaxních supermřížkách. V poslední době to jsou nové typy polovodičů s uspořádanými magnetickými momenty - feromagnetické a antiferomagnetické polovodiče (LiMnAs, NaMnAs, CuMnAs), hexagonální ferity. Delší dobu je vyvíjen software pro fitování celých práškových záznamů najednou (MSTRUCT) zahrnující fyzikálně realistické mikrostrukturní modely. Oddělení magnetických vlastností se věnuje mimo jiné souvislosti magnetických vlastností a struktury [5]. Laboratoř je vybavena několika moderním difraktometry pro studium polykrystalických materiálů i monokrystalů, řada experimentů se provádí na synchrotronech.

K tradičním rtg pracovištím patří i [Ústav fyziky kondenzovaných látek](#) na **Přírodovědecké fakultě Masarykovy univerzity v Brně** (P. Mikulík, M. Meduňa O. Caha, J. Novák, dříve i V. Holý), která dlouhodobě spolupracuje s polovodičovými firmami v Rožnově, což

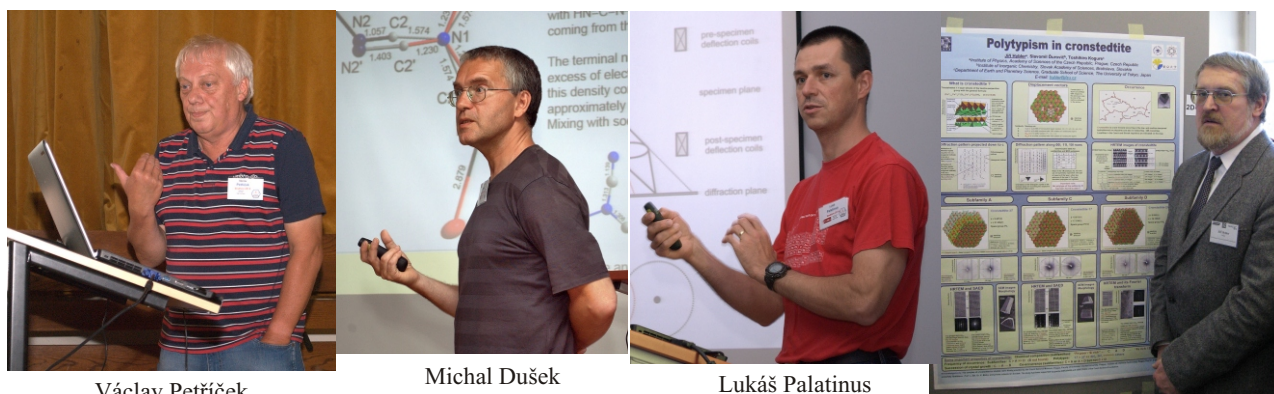


Radomír Kužel a Stanislav Daniš



Mojmír Meduňa

Petr Mikulík



Václav Petříček

Michal Dušek

Lukáš Palatinus

Jiří Hybler

nasměrovalo problematiku na výzkum defektů v krystalickém křemíku, studium vlivu teplotních procesů na precipitaci kyslíku a tvorby dalších defektů. Dále je to studium tenkovrstevnatých struktur a nanostruktur elektronické, optoelektronické a magnetické aplikace. Skupina má rozsáhlé mezinárodní kontakty a v poslední době výrazně vylepšila instrumentální vybavení, které je na špičkové úrovni [6]. Tato skupina též provozuje difraktometr pro tenké vrstvy s rotační anodou v centrální laboratoři pro strukturní analýzu ve Středoevropském technologickém institutu (CEITEC), ve které je dále práškový difraktometr s vysokým rozlišením (P. Roupčová, Z. Spotz). Oba difraktometry jsou vybaveny rozsáhlým příslušenstvím pro in-situ měření.

Fyzikální ústav AVČR v Praze patřil od počátků k hlavním centrům krystalografie v Československu. V současnosti se věnuje strukturní problematice několik oddělení. Zmínit je třeba především dvě.

Hlavní činností **Oddělení strukturní analýzy** je rozvoj krystalografických výpočetních metod. **Systém Jana**, (V. Petříček, M. Dušek), který se stal světovým standardem v oblasti komplikovaných struktur, pokrývá rozsáhlé oblasti krystalografie: servisní krystalografii, nesouměřitelné modulované struktury, souměřitelné struktury, kompozitní struktury a magnetické struktury. Významným rysem programu je schopnost kombinovat data, takže je například možné upřesňovat strukturní model současně proti monokrystalovým a práškovým datům. Novým směrem je precizní elektronová difrakční tomografie (L. Palatinus, M. Klementová) umožňující určování struktur na mikrokrystalech a nanočásticích a jejich dynamické upřesňování [7]. V oddělení má také výrazné zastoupení

strukturní analýza minerálů (J. Hybler – OD struktury, J. Plášil - minerály uranu). V experimentální oblasti se oddělení zabývá vedle zmíněné elektronové difrakce také RTG difrakcí na monokrystalech (M. Dušek) a práškovou difrakcí pro kvantitativní stanovení struktury Rietveldovou metodou (J. Rohlíček). V chemické krystalografii oddělení úzce spolupracuje s J. Fábrym z Oddělení dielektrik.

Laboratoř Rotan (Z. Šourek, J. Kub, V. Studnička, M. Čerňanský) byla založena v roce 1992. V současnosti je vybavena dvěma zdroji s rotační anodou a spolupracuje s prakticky všemi sekcemi ústavu a řeší strukturní problémy spojené s různými směry fyziky kondenzovaných látek a vztahem struktury a vlastností. Zahrnuje to např. kvantitativní fázovou analýzu, určování velikosti krystalitů, amorfni frakce, texturní analýzu. Studia jsou zaměřena např. na nanokrystalické feroelektrické a feromagnetické vrstvy. Systematicky je studován reálný povrch mechanicky opracovaných ocelí a hloubkové profily napětí, změny martenzitických a austenitických fází v intermetalických sloučeninách vykazujících tvarovou paměť. Difrakcí s vysokým rozlišením jsou studovány polovodičové supermřížky a multivrstvy [8].

Fyzikální ústav Slovenské akademie věd v Bratislavě využívá a rozvíjí několik technik rtg strukturní analýzy. **Oddělení multivrstev a nanostruktur** (M. Jergel, P. Šiffalovič, K. Végső, E. Majková) je zaměřené na přípravu a studium tenkých vrstev, multivrstev a nanostruktur pro rtg optiku, spintroniku a senzory. Vedle toho se věnuje procesům samouspořádávání a tvorby nanočásticových souborů metodou Langmuir-Blodgettové [9]. Pro charakterizaci využívá techniky spekulární a nespekulární reflektometrie, malouhlového rozptylu



Marian Čerňanský

Zbyněk Šourek

Edmund Dobročka

(SAXS) a SAXS při šikmém dopadu (GISAXS). Zvláště jsou studovány efekty difúzního rozptylu pro charakterizaci povrchů a rozhraní. Pro SAXS je k dispozici výkonné zařízení Nanostar s intenzivním zdrojem s kapalnou Ga anodou. Pro GISAXS bylo vyvinuté vlastní zařízení lab-GISAXS, které umožnilo poprvé v laboratoři sledovat in-situ procesy tvorby 2D nanočásticových krystalů na rozhraní kapalina-vzduch a testovat nové modely parakrystalu. Další zařízení GISAXS s mikrofokálním zdrojem umístěné na vakuové komoře umožňuje originální in-situ studia růstu a formování tenkých vrstev při depozici dvojítm iontovým svazkem (DIBS).



Matej Jergel

[Oddělení fyziky kovů](#) (P. Švec, D. Janičkovič, M. Krajčí, M. Mihalkovič) bylo jedním z prvních pracovišť, kde byla vyvinutá technologie rychlého ochlazení pro přípravu pásek amorfních kovových slitin s unikátní kombinací mechanických a magnetických vlastností. V současnosti rozvíjí tuto technologii také pro přípravu nových mikrokrytalických a objemových materiálů s cílenými vlastnostmi. V této souvislosti oddělení významně přispělo k teorii intermetalických slitin a kvazikrystalů. K dispozici má několik práškových difraktometrů včetně výkonné sestavy Discover 8 SSS s rotační anodou v **laboratoři MULTIDISC**, kterou využívá spolu s Oddělením multivrstev a nanostruktur pro základní rtg charakterizaci (fázové složení, pnutí, textura). MULTIDISC je společnou laboratoří Fyzikálního a [Elektrotechnického ústavu SAV](#) (E. Dobročka) [10]. Oba ústavy také spolupracují na vývoji nových prvků krystalové rtg optiky pro metrologii a zobrazování.

Krystalografie v analýze uměleckých děl a ve forenzním výzkumu

Tato tématika se začala objevovat na světových a evropských krystalografických konferencích teprve před několika lety, ale stává se pomalu jejich tradiční součástí. V Praze byla založena laboratoř [ALMA](#) (Academic Materials Research Laboratory of Painted Artworks) jako společné pracoviště Akademie múzických umění a Ústavu anorganické chemie AV ČR v Řeži u Prahy (P. Bezdička). Kombinace různých odvětví přírodních věd, umění a historie umožňuje hlubší porozumění malířským technikám a materiálům. Laboratoř ALMA rozvíjí příslušné analytické metody a interpretuje výsledky v kontextu historie umění a historie technologie materiálů. Obzvláště pro rtg difrakci je cílem minimalizovat potřebné množství materiálu a velikost vzorku.



Petr Bezdička



Marek Kotrlý

Laboratoř spolupracuje také s [Kriminalistickým ústavem](#) v Praze (M. Kotrlý), jehož historie sahá do šedesátých let minulého století. Ve forenzní oblasti stále více prosazuje trend určení fáze minimálně dvěma nezávislými metodami. Závěry expertíz jsou podklady pro rozhodování orgánu činných v trestním řízení, tj. rozhodování o vině a trestu, a výsledky proto musí mít co nejvyšší stupeň hodnověrnosti. Zde je úloha XRD metod velmi obtížně nahraditelná, protože umožňuje fázovou analýzu na fyzikální jiném principu než většina standardních analytických metod pro anorganickou i organickou fázi. [11]. Rtg strukturální analýza je využívána např. v následujících oblastech kriminalistické identifikace a komparace: pedologické stopy, mineralogické a petrologické materiály, drahé kameny a další gemologické objekty, pigmentové fáze v nejširším pojetí, povýbuchové zplodiny, komponenty výbušnin, plastické hmoty a polymery, farmaceutické produkty a kosmetické výrobky, stavební materiály, slitiny a kovy, plniva a aditiva, ohnivzdorné a bezpečnostní výplni pláště trezoru.

Krystalografie v mineralogii

Počátek mineralogické krystalografie je spojen s Bohumilem Ježkem a v novější historii s Milanem Riederem. Dnes se hlavní část mineralogického výzkumu v České republice provádí v Národním muzeu v Praze, v [České geologické službě](#) (F. Laufek), [Geologickém ústavu AV ČR](#) (R. Skála), [Přírodovědecké fakultě UK v Praze](#) (V. Goliáš) [12], na [Masarykově univerzitě v Brně](#) (V. Vávra) a Palackého univerzitě v Olomouci i některých dalších institucích, kde je prášková difrakce používána spíše jako rutinní metoda. Česká region je proslulý svými hornickými středisky s mnoha lokalitami a ložisky základních kovů, stříbra, zlata a také uranových rud (jako Kutná Hora, Příbram či Jáchymov). Kolem devadesáti nových mineralogických druhů z těchto lokalitách bylo popsáno a schváleno Mezinárodní mineralogickou asociací. Každý rok se objevuje několik dalších popisů a určených krystalových struktur přírodních krystalových fází. Z posledních nálezů lze zmínit například novou fázi vavřínit ze severních Čech, lithochlebit ze severomoravského



Viktor Goliáš



František Laufek



Milan Rieder



Roman Skála

uranového naleziště, světle zelený slavkovit nebo oranžovo-žlutý sejkoraít-(Y) z jáchymovského naleziště.

Chemická krystalografie

Chemická krystalografie nemá u nás tak bohatou tradici jako v některých jiných zemích, ale přesto lze najít několik významných pracovišť.

Je to např. **Přírodovědecká fakulta**

UK v Praze, katedra anorganické

chemie (I. Císařová, D. Havlíček, P.

Vojtíšek, D. Nižňanský), kde bylo v

roce 2000 vytvořeno Centrum moleku-

lových a krystalových struktur, jehož

nejpodstatnější částí je difraktometr

Nonius KappaCCD s plošným detek-

torem umožňujícím stanovit tři krysta-

lové struktury malých molekul denně.

Možnosti práškových metod se pak podstatně rozšířily

2009. Oblasti studia se dělí na: I. struktury monokrystalu:

nově připravené látky v oblasti chemie (anorganická a



Ivana Císařová



Michal Hušák



Bohumil Kratochvíl



Jaroslav Maixner

monitorování polymorfismu farmaceutických substancí (anhydráty, hydráty, soli a ko-kryštaly). Významně se rozvíjí metodika řešení struktury substancí z prášku a vývoj krystalografického software [14]. Skupina se zasloužila o významnou propagaci RTG difrakční metodiky ve farmaceutických firmách (Teva, Zentiva, Interpharma ad.). Skupina anorganických pevných látek (F. Kovanda, D. Koloušek, B. Doušová) se zabývá charakterizací nových materiálů pro katalýzu, ekologické aplikace, geopolymery atd.

Na VŠCHT Praha je zařízena i **laboratoř rtg difraktometrie** jako součást **Centrálních laboratoří** (J. Maixner, R. Pažout). Jejím hlavním posláním je servisní stanovování fázového složení, vyhodnocování difrakčních záznamů a prvkového složení vzorků (RTG fluorescenční analýza). K dalším aktivitám patří stanovování struktury malých organických molekul z prášku i monokrystalů, včetně pěstování monokrystalů (J. Cibulková) a zjištění ování struktur přírodních sulfosolů monokrystalovou difrakcí na fragmentech zrn separovaných z nábrusů.[14].

Skupina molekulárních simulací, katedry chemické fyziky a optiky Matematicko-fyzikální fakulty UK v Praze bylo založeno v roce 1997 (M. Pospíšil, J. Burda) [15]. Simulace pomocí Materials Studia jsou zejména zaměřeny na výpočty různých typů silikátů interkalovaných organickými molekulami, molekul porfyrinů, neuspořádaných



David Havlíček



Pavel Vojtíšek

organická), minerály, přírodní látky; II. práškové metody: kvalitativní a kvantitativní fázová analýza, stanovení velikosti částic [13].

Dále **Ústav chemie pevných látek VŠCHT Praha** (B. Kratochvíl, M. Hušák, J. Čejka), Na Vysoké škole chemicko-technologické v Praze se rozvoji a aplikaci RTG difrakčních metod věnuje především Ústav chemie pevných látek. Skupina chemie organických pevných látek (B. Kratochvíl, M. Hušák, J. Čejka) se zabývá aplikací RTG strukturální analýzy ve farmaceutickém průmyslu. Především se jedná o korelaci struktury a vlastností a



Miroslav Pospíšil



Dalma Gyepesová



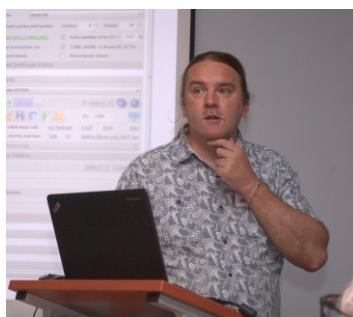
Lubomír Smrčok

vrstevnatých systémů, polovodičů s fotokatalytickými vlastnostmi adsorbovaných na površích jílů.

Na Slovensku je třeba vyzdvihnout minimálně tři pracoviště. Je to **Ústav anorganické chemie SAV**, zejména [oddělení teoretické chemie](#), v Bratislavě (L. Smrčok, S. Ďurovič, D. Gyepesová) [16]. Z mnoha strukturních studií lze zmínit určení krystalové a elektronové struktury chirálních derivátů sacharidů, komplexy mědi(II) obsahující Schiffovu bázi a krystalovou strukturu kronstetit-3T a její polytypy. Současné aktivity jsou zaměřené na vývoj pokročilých výpočetních metod elektronových korelací v molekulách a pevných látkách, magnetické a elektrické vlastnosti středně velkých systémů organometalických a biologicky a katalyticky aktivních látek kombinací experimentálních metod (strukturní analýza, vibrační spektroskopie) s přesnými DFT výpočty.

Rozvoj krystalografie v Bratislavě je úzce spjat s rozvojem koordinační chemie. Dnes je to stále hlavní téma výzkumu na [Fakultě chemické a potravinářské technologie Slovenské technické univerzity](#), zejména na [Ústavu anorganické chemie, technologie a materiálů](#) (M. Koman, V. Jorík, J. Moncol) [17] a [Ústavu fyzikální chemie](#) (J. Kožíšek).

V roce 2006 v rámci projektu: "Vybudování excelentního pracoviště na řešení elektronové struktury pevných látek" byla na katedře fyzikální chemie zřízena laboratoř rtg monokrystalové strukturní analýzy a tak vzniklo pracoviště pro studium nábojových hustot převážně koordinačních sloučenin. Ve spolupráci s teoretickými chemiky byl tak vytvořen důležitý nástroj pro studium korelace struktura - vlastnosti [18]. Z velmi přesných rtg měření difrakčních dat při 100 K je možné



Ján Moncol

multipolárním zpřesněním získat rozdělení elektronové hustoty a následně topologickou analýzou určit charakteristiky vazeb. Integrací elektronové hustoty v atomovém bazénu lze získat náboje na jednotlivých atomech. Z takto získaných



Jozef Kožíšek



Slavo Ďurovič

výsledků v krystalu je možné potom uvažovat o vlastnostech dané látky v různých prostředích (v roztocích, v živých organizmech).

V současnosti se sledují aktuální a perspektivní trendy v koordinační chemii s orientací na komplexní objekty, fyzikálně či chemicky vysoce funkční a to zejména jako materiály a katalyzátory, nebo působí v živých organizmech a v ochraně životního prostředí. To zahrnuje i přípravu, studium struktury, chemické reaktivity a biologické aktivity sloučenin, které mají perspektivu využití v lidské či veterinární medicíně, slouží jako prekurzory na přípravu nových materiálů a vystupují v katalytických procesech. V poslední době se rozvíjí i výzkum biokoordinačních sloučenin, zejména karboxylátové komplexy mědi a železa s biologicky aktivními ligandy.

Toto pracoviště dlouhou dobu úzce spolupracuje s katedrou anorganické chemie ([laboratoř strukturní analýzy Přírodovědecké fakulty Univerzity P. J. Šafárika v Košicích](#) (J. Černák) [19]. Studovány jsou zejména kyanidokomplexy Ni, Cu, Pd a Pt a komplexy obsahující biologicky aktivní ligandy.

Chemická krystalografie má tradici i na [katedře anorganické chemie Univerzity Palackého v Olomouci](#) (Z. Trávníček, J. Kameníček) [20]. V současnosti se zaměřuje na nové komplexní sloučeniny přechodných prvků v těchto oblastech: vývoj nových typů biologicky aktivních sloučenin s medicínským aplikačním potenciálem (např. látky s protinádorovými, protizánětlivými, antidiabetickými účinky); přípravu a studium



Juraj Černák



Zdeněk Trávníček



Jiří Kameníček



Jindřich Hašek

molekulových magnetů a molekulových přepínačů s aplikačním potenciálem v oblasti senzorů, paměťových či záznamových médií s vysokou hustotou záznamu; studium hybridních molekulárně-krystalických nanostruktur s funkcionalizovaným nanokrystalickým nosičem na bázi oxidů železa a navázanou koordinační sloučeninou kombinující vlastnosti obou složek

Další skupiny zabývající se chemickou krystalografií lze nalézt např. na [Univerzitě Pardubice](#) či Ústavu chemie Masarykovy univerzity v Brně ([výzkumná skupina koordinační chemie a krystalografie](#)).

Proteinová krystalografie

Čeští a slovenští vědci publikovali své práce z proteinové krystalografie již před rokem 1990, avšak v té době získávali své výsledky vždy ve spolupráci se zahraničními pracovišti. V posledních letech se však tento obor rozvíjí, vznikla i česká společnost pro strukturní biologii a jejích výročních konferencí se zúčastňuje vždy přes stovku lidí, zejména mladých.

První skutečnou investicí do tohoto oboru byl společný projekt Ústavu molekulární genetiky Molecular Genetics (P. Řezáčová, J. Sedláček, J. Brynda) a Ústavu makromolekulární chemie AV ČR v Praze v roce 1998 (J. Hašek, J. Dohnálek).

V současnosti vznikají krystalografické publikace na asi osmi pracovištích, které mají krystalografii jako svoji primární aktivitu.

Skupina v Ústavu makromolekulární chemie AV ČR (J. Hašek, J. Dohnálek, P. Kolenko a další) [21] se v současnosti přesouvá do Biotechnologického ústavu ([laboratoř strukturní analýzy makromolekul](#))

Významná skupina je v Ústavu molekulární genetiky ([Laboratoř strukturní biologie](#), P. Řezáčová, J. Brynda, J. Sedláček), která se zabývá proteázou z viru HIV, potenciálními mi léčebnými monoklonálními protilátkami a některými bílkovinami charakteristickými pro lidské nádory (galektin 4 a karbonická anhydráza 9) a další skupiny v. [Ústavu organické chemie a biochemie](#)

[Biotechnologický ústav](#) AV ČR (B. Schneider) byl založen v roce 2008 jehož cílem je základní výzkum v oblasti molekulárně biologických věd na špičkové úrovni a převod biotechnologických metod a molekulárních nástrojů k diagnostice a léčbě patologického stavu buňky do humánní a veterinární medicíny, případně dalších



Jan Dohnálek

Jan Stránský, Petr Kolenko

důležitých oblastí lidské činnosti [22].

[Národní centrum pro výzkum biomolekul](#) Masarykovy univerzity v Brně je nezávislá jednotka zaměřená na biologický a chemický výzkum (M. Wimmerová, G. Demo) [23] s poměrně velkým lidským potenciálem zejména mladších pracovníků a širokým záběrem.

CEITEC

Relativně velmi široké spektrum krystalografických metodik je využíváno v brněnském Středoevropském technologickém institutu CEITEC a jeho centrálních laboratořích.

Centrální laboratoř RTG difrakce a Bio-SAXS CEITECu (J. Marek, T. Klumpler, M. Babiak) je orientována na experimentální podporu vědecké komunity využívající jednak izotropní malouhý rozptyl RTG záření



Bohdan Schneider

Gabriel Demo



Ivana Kutá Smatanová, Pavlína Řezáčová



Lubica Urbániková (vpravo)



Jiří Brynda

(SAXS) na koloidních roztocích biologických a nanočásticových vzorků s cílem určit strukturu studovaných vzorků do nízkého rozlišení, jednak difrakci RTG záření na monokrystalech s cílem určit struktury krystalů jak “malých” molekul, tak i biologických makromolekul do rozlišení atomového.

Strukturní výzkum se provádí i na [Farmaceutické fakultě](#) Veterinární a farmaceutické univerzity v Brně (F. Pavelčík).

Jedním z prvních pracovišť, která se věnovala výzkumu biomolekul byl [Ústav molekulární biologie](#) SAV v Bratislavě (J. Ševčík, L. Urbániková) [24]

Laboratoř [krystalogeneze a biomolekulární krystalografie](#) byla založena v roce 2002 jako část Ústavu fyzikální biologie Jihočeské univerzity v Českých Budějovicích, později se stala součástí Ústavu systémové biologie a ekologie AVČR, nyní [Ústavu nanobiologie a strukturní biologie](#) (I. Kutá Smatanová, R. Ettrich) a je umístěna v Akademickém a univerzitním centru v Nových Hradech [25]. Zabývá se strukturními studii membránových a ve vodě rozpustných makromolekulárních komplexů. V laboratoři se soustavně vyvíjejí a testují alternativní a pokročilé krystalizačních techniky.

Mezi pracovišti užívajícími výsledky proteinové krystalografie lze uvést [1. lékařskou fakultu UK](#) (P. Martásek, I. Mikula), [Přírodovědeckou fakultu UK](#) (T. Obšil), [Mendelova univerzita v Brně](#) (B. Brzobohatý) [Palackého Univerzita](#) v Olomouci.



Tomáš Obšil



František Pavelčík



Pavel Strunz



Přemysl Beran

Zkoumaná témata proteinové krystalografie jsou široká od medicínských a zemědělských aplikací (návrh léčiv, genetické nemoci, transmembranový transport, biokompatibilní materiály atd.) po výrobu potravin a průmyslové aplikace (enzymové inženýrství, nové produkty, aktivita za extrémních podmínek apod). Studia jsou také orientována na teoretické vysvětlení samorganizace a efektivitu procesů v makromolekulárních systémech.

Rozptyl neutronů

Centrum neutronového rozptylu v Ústavu jaderné fyziky AV ČR v Řeži u Prahy (P. Mikula, P. Lukáš, J. Strunz, J. Šaroun, P. Beran) funguje od roku 1965 [26]. Tradiční výzkum zaměřený na neutronovou optiku se nyní soustřeďuje na vícenásobné reflexe na dokonalých krystalech a zahnutých sendvičových krystalech a zahrnuje i vývoj Monte Carlo simulací (software RESTRAX). Postaven byl kompletní přístroj na neutronovou interferometrii. Efektivní zakřivené fokusující monochromátory a nové polohově citlivé detektory otevřely nové možnosti ve výzkumu materiálů a mapování zbytkových napětí (sváry, kompozity a funkční gradované keramiky) a zkoumání napětí in-situ v mechanickém namáhání (nanokrystalické oceli s vysokou pevností, bezintersticiální oceli, duplexní a vícefázové oceli, martenzitická transformace ve slitinách s tvarovou pamětí). Byl navržen a zkonstruován nový typ zařízení pro malouhlový neutronový rozptyl (SANS) s vysokým rozlišením (MAUD) užitečný pro charakterizaci nehomogenit o rozměrech 20 nm - 1 μ m (např. velké precipitáty v superslitinách, porozita keramik, dutiny v superplastických keramikách).

Moderní práškový difraktometr MEREDIT [27] je vybaven multidetektorovým systémem, výměnnými



monochromátory a zařízeními pro různá prostředí vzorku (vakuová a radiační pec, deformace, uzavřený kryostat). V současnosti je užíván např. pro studia archeologických artefaktů, studium materiálů pro palivové články a uchovávání vodíku, krystalové a magnetické struktury látek s magnetokalorickým jevem, identifikaci magnetických struktur v meteoritech a polovodičových antiferomagnetech.

Rentgenová optika

Kromě studia neutronové optiky dosahuje u nás výborných výsledků i výzkum optiky rentgenové. [Skupina rtg optiky Fyzikálního ústavu AVČR](#) (J. Hrdý, P. Oberta) se zabývá využitím výsledku teorie difrakce k vývoji polyfunkčních optických prvků na bázi dokonalých monokrystalů. Ve spolupráci s průmyslem (ABB s.r.o.) úspěšně pracuje na vývoji, návrhu, testování a výrobě chlazených monochromátorů pro synchrotrony. Podařilo se vyvinout i zakřivený monochromátor



Jaromír Hrdý

Dušan Korytár

pracující na bázi difrakčně-refrakční optiky. 1-D a 2-D monolitická krystalová optika užívající asymetrické ploché difraktoři je vyvíjena v [oddělení technologie a diagnostiky polovodičů](#) Elektrotechnického ústavu SAV v Piešťanech (D. Korytár). Navržena, následně vyrobena a úspěšně testována na synchrotronech byla in-line optika s paralelními vstupním a výstupním svazkem. Na vývoji rtg optiky spolupracuje také skupina M. Jergela z Fyzikálního ústavu SAV v Bratislavě (viz výše).

1. [M. Černík, I. Kohútek, A. Leško, Materials Structure, 18 \(2011\), 221-230.](#)
2. [M. Čaplovič, Materials Structure, 17 \(2010\) k38-k40.](#)
3. [N. Ganev, S. Vratislav, Z. Pala, K. Kolařík, Materials Structure, 17 \(2010\) k42.](#)
4. [J. Filip, Materials Structure, 17 \(2010\), k64.](#)
5. [R. Kužel, S. Daniš, V. Holý, Materials Structure, 17 \(2010\), k68.](#)

6. [M. Međuňa, O. Caha, P. Mikulík, Materials Structure, 17 \(2010\) k22-k27.](#)
7. [M. Dušek, Materials Structure, 17 \(2010\), k43-k46.](#)
8. [Z. Šourek, Materials Structure, 17 \(2010\), k9-k11.](#)
9. [M. Jergel et al, Materials Structure, 17 \(2010\), k17-k21.](#)
10. [E. Dobročka, M. Jergel, Materials Structure, 17 \(2010\), k12-k16.](#)
11. [M. Kotrlý, Materials Structure, 17 \(2010\), k57.](#)
12. [V. Goliáš, Materials Structure, 17 \(2010\), k35-k38.](#)
13. [I. Císařová, Materials Structure, 17 \(2010\), k58.](#)
14. [J. Rohlíček, B. Kratochvíl, 17 \(2010\), k58-k59.](#)
15. [M. Pospíšil, M. Veteška, P. Kovář, Materials Structure, 17 \(2010\), k65-k57.](#)
16. [L. Smrček, D. Gyepesová, S. Ďurovič, Materials Structure, 18 \(2011\) 227-228.](#)
17. [M. Koman, G. Ondrejovič, Materials Structure, 17 \(2010\), k60-k62.](#)
18. [J. Kožíšek, Materials Structure, 17 \(2010\), k63.](#)
19. [J. Černák, Materials Structure, 18 \(2011\), 269-270.](#)
20. [D. Krausová, J. Kameníček, Z. Trávníček, J. Walla, Materials Structure, 8 \(2001\), 67-73.](#)
21. [J. Hašek, Materials Structure, 17 \(2010\), k32-k34.](#)
22. [B. Schneider, Materials Structure, 17 \(2010\), k28.](#)
23. [G. Demo, M. Wimmerová, Materials Structure, 17 \(2010\), k31.](#)
24. [J. Ševčík, Materials Structure, 18 \(2011\), 214-220.](#)
25. [I. Kutá Smatanová, Materials Structure, 17 \(2010\), k29.](#)
26. [P. Mikula, Materials Structure, 9 \(2001\) 52-64.](#)
27. [P. Beran, Materials Structure, 17 \(2010\), k54-k56.](#)

NĚKTEŘÍ ÚSPĚŠNÍ KRYSTALOGRAFOVÉ PŮSOBÍCÍ V ZAHRANIČÍ



Jiří Kulda, Institute Laue Langevin, Grenoble



Jan Ilavský, Argonne National Laboratory, USA



Vratislav Lagner, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden



David Rafaja, Bergakademie - Technical University, Freiberg, Germany



Radovan Černý, University of Geneva, Switzerland

