

## Před sto lety zemřel Wilhelm Conrad Röntgen

Röntgen objevil záření, které se dodnes nazývá jeho jménem. Je velmi užitečné pro tomografii, ale i pro chemii: jako způsob spektrální analýzy a difrakce krystalografickou strukturou látek. Difrakce Röntgenova záření umožňuje nejen určit  $x$ -,  $y$ -,  $z$ - souřadnice atomů v molekule s přesností 0,02 Å, ale objevila také, že toto určení je svým způsobem transcendentní, neboť uspořádání atomů v jednotlivých elementárních buňkách struktury krystalických látek se vzájemně liší a je leckdy dost nepravidelné – a to v řadě aspektů – což více nebo méně ovlivňuje vlastnosti těchto látek<sup>1</sup>.

Jedním ze způsobů, jak se (reálné) krystalické látky liší od ideálních (na tomto světě se nevyskytujících) krystalů (s absolutně pravidelnou vnitřní strukturou) je parakrystalinita<sup>2</sup>. Na rozdíl od stavebního principu ideálních krystalů – přísné poziční periodicity, je způsob vzájemného uložení „nejbližších sousedů“ (buněk, molekul, atomů) ve struktuře parakrystalu v zásadě stochastický. To znamená, že se mění v určitých mezích, když přecházíme od jednoho páru sousedních motivů k druhému. I když tyto odchylky nejsou velké, kumulují se, přejdeme-li od „nejbližšího souseda“ ke 2., 3. a 4. sousednímu motivu, takže poloha  $n$ -tého motivu vzhledem k výchozímu („nultému“) motivu bude už pak náhodná. Zatímco struktura (ideálního) krystalu je „globálně“ periodická, jeví struktura parakrystalu přibližnou periodicitu jen lokálně, do určité vzdálenosti od (libovolného) uvažovaného atomu.

Kapalné krystalý<sup>3</sup> jsou látky, které již svým názvem vyjadřují, že jsou jakýmsi hybridem mezi krystalý – s ideálně pravidelnou vnitřní strukturou – a kapalinou – se strukturou, jež jakoukoli pravidelnost postrádá. Nepravidelnost vnitřní struktury kapalných krystalů je specificky anizotropní, v určitém směru (resp. v určitých směrech) jsou molekuly uspořádány pravidelně, jako v krystalech, v jiném směru (resp. směrech) tak nepravidelně jako u kapalin. Je to způsobeno výraznou anizotropií tvaru molekul, které jsou u většiny kapalných krystalů lineární (kalamitické, t.j. nematické, smectické a cholesterické mezofáze) nebo destičkovité (diskotické kapalné krystalý), či s výraznou anizotropií vazby těchto molekul (mezofáze pyramidální, kolumnární, stýlické a fazmidické).

Roku 1984 se objevila první zpráva o látkách, jejichž struktura není vytvořena periodickým opakováním jediné základní buňky, jako je tomu u krystalů, ale kvaziperiodic-

kým uspořádáním několika (minimálně dvou) buněk. Tento stavební způsob umožňuje, aby nové látky – jimž se začalo říkat kvazikrystalý<sup>4</sup> – jevíly symetrii, která je u krystalů nemožná – aby např. měly pětičetnou osu symetrie. Zprvu se sice předpokládalo, že existence kvazikrystalů je jenom časná, že jsou to látky nestabilní. Pozdější teoretické rozborý však prokázaly, mimo jakoukoli pochybnost, že základní stav systému částic, jež na sebe působí silami krátkého dosahu, může být kvazikrystalický v důsledku konkurence mezi vzájemně protikladnými požadavky, které na uložení atomů do krystalu klade jednak pořádek na blízko, jednak pořádek na dálku.

Ukázalo se také, jak strukturu látek ovlivňuje její disperzní stav<sup>5</sup>. Kupříkladu, že materiál při svém „žítí“ rytmicky mění svou disperzi, což je dnes hlavní příčinou omezené životnosti dílců a konstrukcí z toho materiálu vyrobených (únava, něco jako ateroskleróza omezující délku života lidí [žalm 90:10]; asi i W. C. Röntgen na ni zemřel)<sup>6,7</sup>.

Jestliže pak jest ambiciózním cílem chemie nalézat závislost vlastností látek na jejich struktuře, vzpomínáme při stoletém výročí úmrtí Röntgena na jeho práci, která poznávání této závislosti přispěla.

Jaroslav Fiala

## LITERATURA

1. *Defect and Microstructure Analysis by Diffraction* (Snyder P. L., Fiala J., Bunge H. J., ed.). International Union of Crystallography, Oxford University Press, New York 1999.
2. Hosemann R., Bagchi S. N.: *Direct Analysis of Diffraction by Matter*. North Holland, Amsterdam 1962.
3. Stephen M. J., Straley J. P.: *Rev. Mod. Phys.* 46, 617 (1974).
4. Nelson D. R.: *Sci. Am.* 254, 43 (1986).
5. Fiala J., Kraus I.: *Povrchy a rozhraní*, Česká technika – nakladatelství ČVUT, Praha 2016.
6. Fiala J., Mazal P., Skřivánková V., Mohammad H.: *Proceedings of NDE for Safety / Defektoskopie 2019* (Pazdera L., Mazal P., Turek P., ed.), Brno University of Technology, Brno 2019.
7. Kraus I., Fiala J.: *Krystalografie*. Česká technika – nakladatelství ČVUT, Praha 2021.