

## Krystalografové si „posvítili“ na nejlehčí atomy v nejmenších krystalech

*Vědci z Fyzikálního ústavu AV ČR stojí v čele mezinárodního týmu, který vyvinul novou metodu analýzy rozptylu elektronů na nanokrystalických materiálech. Tato metoda dosáhla takové přesnosti, že pomocí ní bylo možné určit pozice i těch nejlehčích existujících atomů – atomů vodíku. Přesnost a spolehlivost metody byla demonstrována v práci, která vychází 13. ledna 2017 v časopise Science a popisuje určení pozice vodíků ve dvou různých materiálech.*

Strukturální krystalografie je vědní obor zabývající se určováním atomární struktury krystalických látek. Znalost krystalové struktury je základem pro rozvoj řady vědních oborů jako je například materiálové inženýrství, organická i anorganická chemie, farmacie či molekulární biologie. Přes bouřlivý rozvoj strukturální krystalografie během celého dvacátého století zůstávají i v tomto oboru nevyřešené či obtížně řešitelné problémy. Jedním z nich je spolehlivá strukturální analýza nano- a mikrokrytalů, tedy krystalů o rozměrech okolo jednoho mikrometru či menších. To znamená velký problém v řadě oborů jako například příprava nových materiálů, syntéza katalyzátorů pro chemický průmysl, vývoj farmaceutik nebo geovědy, kde zajímavé materiály netvoří dostatečně velké krystaly.

I v oblasti analýzy nanokrystalů došlo v posledním desetiletí k velkému pokroku díky rozvoji nových technik využívajících rozptyl (difrakci) elektronů na krystalech. Doposud ovšem tato metoda poskytovala pouze přibližné informace a neumožňovala určit všechny potřebné detaily krystalové struktury. Mezinárodní tým pod vedením vědců z Oddělení strukturální analýzy Fyzikálního ústavu AV ČR proto v posledních letech intenzivně pracoval na vývoji metody, která by toto omezení odstranila a zvýšila přesnost strukturální analýzy pomocí elektronové difrakce. Cíle se podařilo dosáhnout díky využití pokročilých výpočetních postupů a vývojem nových algoritmů pro zpracování dat.

Úspěch nové metody demonstruje její použití pro určení pozice nejlehčích ze všech atomů – atomů vodíku. Atom vodíku obsahuje pouze jeden proton a jeden elektron a proto dává v elektronové difrakci nejslabší signál. Spolehlivá detekce atomů vodíku je obecně považována za jeden z nejobtížnějších úkolů při určování krystalové struktury a pomocí elektronové difrakce byla doposud zcela nemožná. Práce vznikla ve spolupráci s vědci z francouzského CNRS v Caen a byla publikována v prestižním časopise Science. V práci byly analyzovány struktury dvou látek – organické látky paracetamolu, což je účinná složka řady analgetik a antipyretik, a hydratovaného hlinitofosforečnanu kobaltnatého. Ten byl vybrán jako reprezentant anorganických materiálů s trojrozměrně propojenou strukturou, které jsou hojně využívány v chemickém průmyslu jako sorbenty a katalyzátory. V obou případech se podařilo určit pozice všech vodíkových atomů v krystalové struktuře.

Vyvinutá metoda přináší kvalitativní posun v možnostech analýzy krystalických materiálů a vzhledem k širokému použití krystalografie v přírodních vědách má potenciál přispět k rozvoji celé řady vědních oborů.

### **Reference:**

**Hydrogen positions in single nanocrystals revealed by electron diffraction.** L. Palatinus, P. Brázda, P. Boullay, O. Perez, M. Klementová, S. Petit, V. Eigner, M. Zaarour and S. Mintova, *Science* (2017).

<http://science.sciencemag.org/>

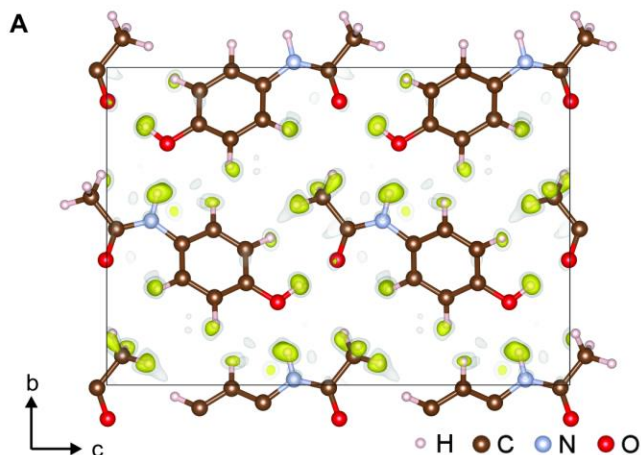
### **Kontakt:**

Dr. rer. nat. Lukáš Palatinus, Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Na Slovance 2, Praha 8, 182 21

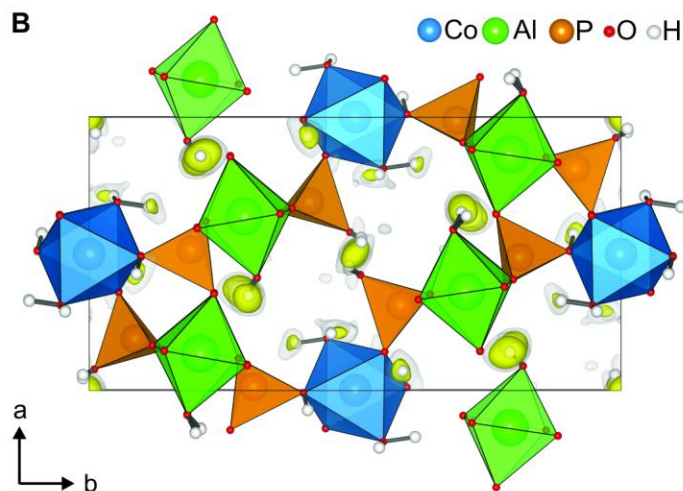
e-mail: [palat@fzu.cz](mailto:palat@fzu.cz)

tel.: +420 737 532 475

**Popisky k obrázkům a videím:**



**Obrázek „TZ\_Science\_vodiky\_A.png“:** (A) Struktura formy II paracetamolu s diferenčním elektrostatickým potenciálem znázorněným pomocí šedých a žlutých isopovrchů. Maxima v elektrostatickém potenciálu odpovídají pozicím vodíkových atomů ve struktuře. Strukturu paracetamolu zobrazuje též video dostupné na: [http://www-xray.fzu.cz/press/hydrogens\\_in\\_paracetamol.mp4](http://www-xray.fzu.cz/press/hydrogens_in_paracetamol.mp4)



**Obrázek „TZ\_Science\_vodiky\_B.png“:** (B) Struktura formy hydratovaného hlinítofosforečnanu kobaltnatého s diferenčním elektrostatickým potenciálem znázorněným pomocí šedých a žlutých isopovrchů. Maxima v elektrostatickém potenciálu odpovídají pozicím vodíkových atomů ve struktuře. Strukturu hlinítofosforečnanu kobaltnatého zobrazuje též video dostupné na: [http://www-xray.fzu.cz/press/hydrogens\\_in\\_CAP.mp4](http://www-xray.fzu.cz/press/hydrogens_in_CAP.mp4)



**Obrázek “Cover\_Science\_vodiky.png”:** Obálka časopisu Science z 13. ledna 2017 je zaměřena na článek dr. L. Palatinuse a kol. *(Je nezbytné používat celou obálku, není možné použít jen její výřez.)*