

Určování struktury látek pomocí difrakčních technik

Róbert Gyepes

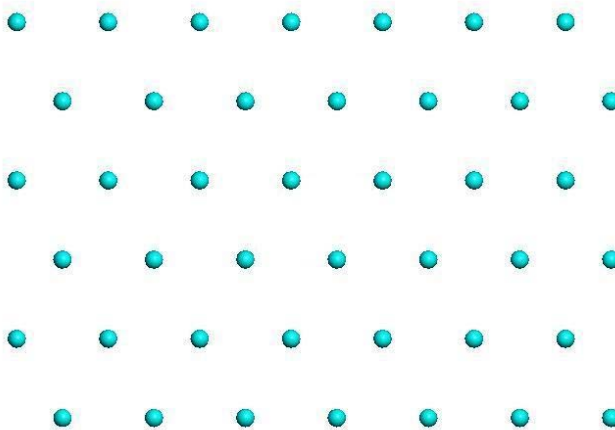
(Přírodovědecká fakulta University Karlovy v Praze;
gyepes@natur.cuni.cz)

Moderní chemie považuje požadavek znalosti struktury zkoumaných látek za naprostou samozřejmost, neboť správné určení struktury umožňuje kromě pochopení četných vlastností látek také interpretaci a dokonce predikci jejich chování při chemických reakcích.

Již delší dobu bylo možno provést částečné nebo i úplné stanovení struktury látek na základě několika spektrálních metod, jako např. nukleární magnetickou rezonanci, infračervenou spektroskopii, hmotnostní spektrometrii a dalších. V posledních letech se však díky prudkému vývoji instrumentální a výpočetní techniky staly rentgenové difrakční metody téměř rutinní metodou základního výzkumu a dovolují získat i takové informace o struktuře zkoumaných látek, které byly před rozmachem strukturní analýzy pouze obtížně (pokud vůbec) dostupné.

Difrakční metody totiž poskytují *přímé* informace o struktuře molekul a krystalů, kdežto ostatní metody dnes používané ke stejnému účelu poskytují pouze informace *nepřímé*; odvození struktury zkoumané látky na základě nepřímých veličin může ale představovat vážný problém. Výsledkem úspěšné difrakční analýzy bývá přesné určení prostorového uspořádání stavebních jednotek (atomů, aminokyselin, apod.), umožňující snadnou vizualizaci struktury. Vhodně provedené difrakční experimenty nám navíc umožňují studovat i některé důležité fyzikální vlastnosti látek (např. modulace krystalové mřížky, fázové přechody, magnetismus, povrchové efekty, tenké vrstvy). Díky rozvoji výpočetní techniky se stalo difrakční studium struktury biologicky významných molekul (např. proteinů) také naprostou samozřejmostí.

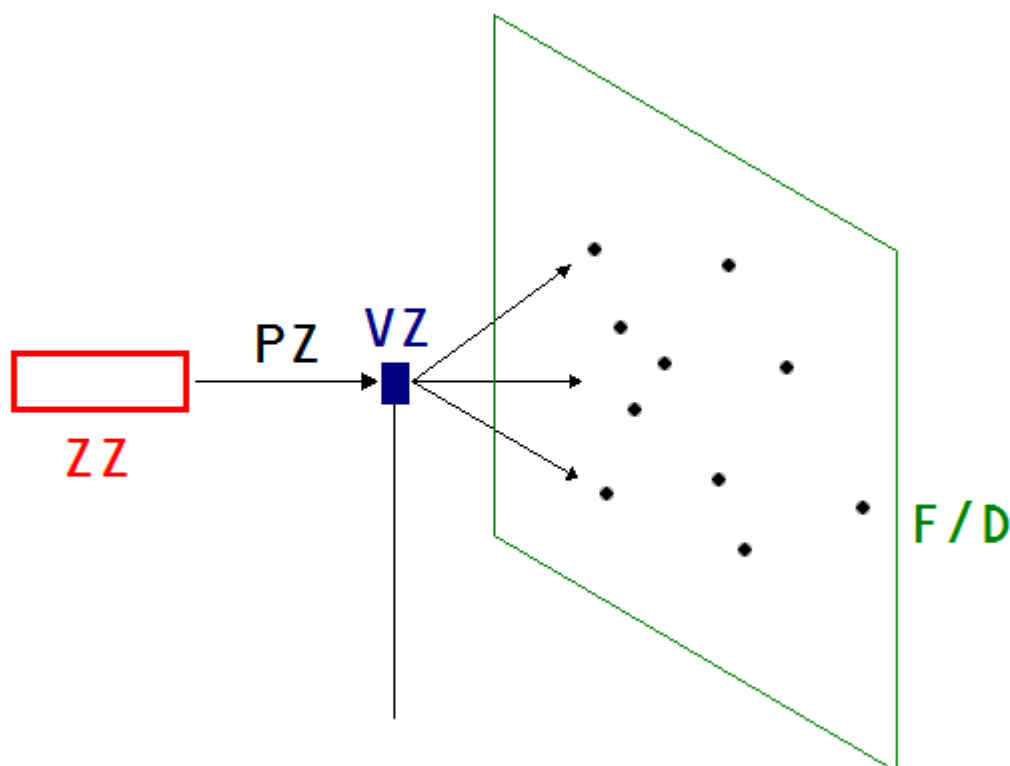
Společným jmenovatelem všech difrakčních experimentů je studium difrakce (interference) vhodného elektromagnetického záření na periodicky se opakujícím motivu. Tento periodicky se opakující motiv může vzniknout vhodným uskupením jednotlivých atomů, ale třeba i párováním molekul či iontů v pevném stavu. Jelikož se jednotlivé látky mohou při výstavbě periodického motivu značně lišit, bývá účelné si jejich popis zjednodušit zavedením tzv. **krystalové mřížky**. Mřížku zkonstruujeme tak, že si všimáme pouze periodického uspořádání základních stavebních motivů (atomů, iontů, molekul...). Tyto stavební motivy nahradíme jediným (abstraktním) bodem a uspořádání jednotlivých mřížkových bodů pak dá vzniknout vlastní krystalové mřížce (Obr. 1).



Obr. 1. Krystalografická mřížka

Díky své periodicitě se krystalografická mřížka chová jako mřížka optická, na které při splnění jistých podmínek může dojít i k interferenci či difrakci elektromagnetického záření. Nutnou podmínkou pro pozorování difrakce je ovšem použití elektromagnetického záření se srovnatelnou vlnovou délkou s periodicitou optické (krystalové) mřížky. Pro běžně studované látky leží tato periodičita zhruba kolem 10^{-9} m a pro pozorování difrakce je třeba používat Röntgenovo záření.

Vlastní difrakční experiment spočívá v ozáření zkoumané látky rentgenovým zářením a současné detekci záření difraktovaného vzorkem (Obr. 2).

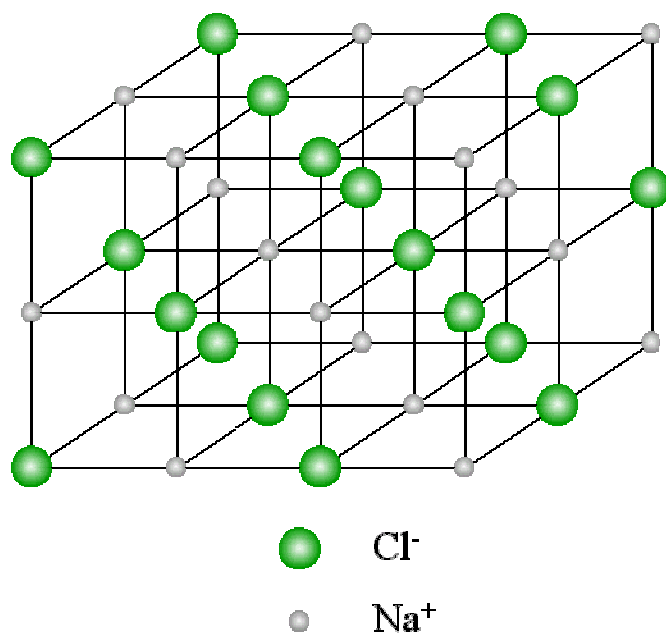


Obr.2. Schématické znázornění difrakčního experimentu.

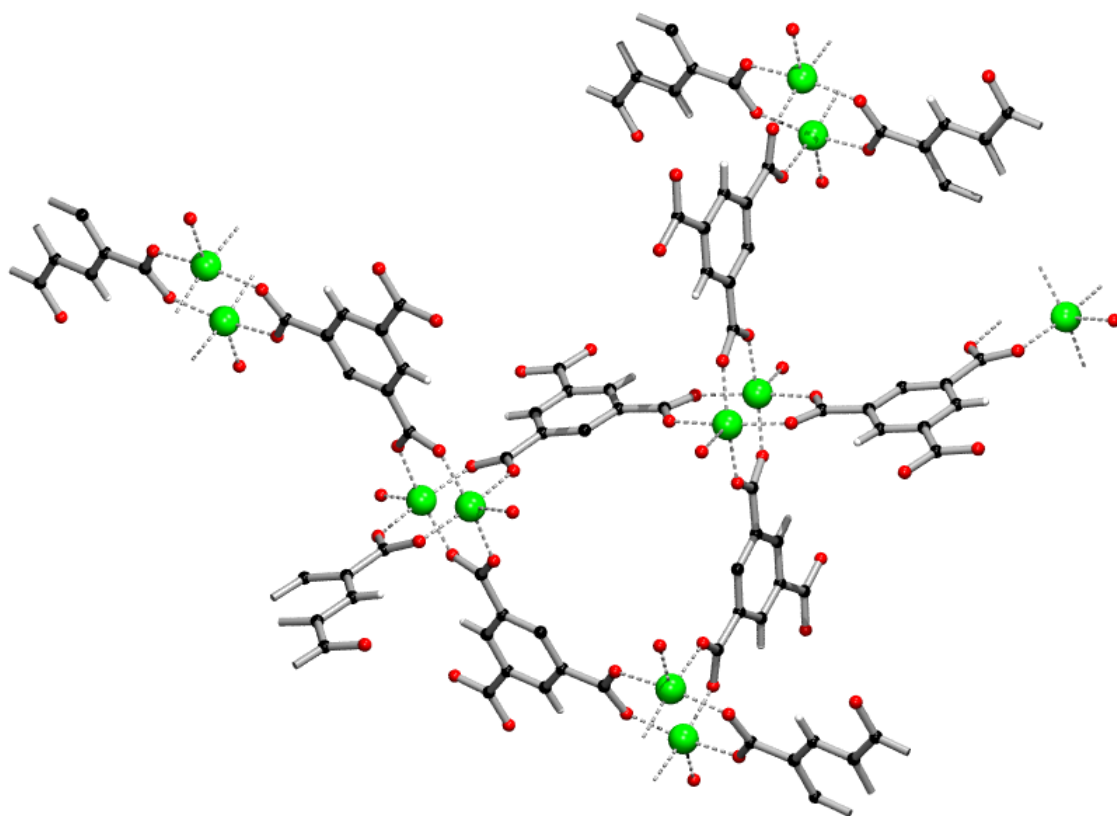
Legenda: ZZ – zdroj primárního záření, PZ – primární záření, VZ – vzorek, F/D – fotografický film nebo detektor záření. Tečky na detektoru znázorňují jednotlivé difrakce.

Při záznamu difrakčního obrazu je třeba určit jak přesnou polohu, tak i intenzitu jednotlivých difrakčních stop (difrakcí). Difrakční obraz nasnímaný filmem či detektorem záření ovšem ani trošku nepřipomíná jakoukoliv chemickou strukturu, kterou je možno získat teprve po matematickém zpracování poloh a intenzit naměřených difrakcí. Toto zpracování se dnes provádí zásadně na výkonných samočinných počítačích.

Úspěšná strukturní analýza poskytne po zpracování experimentálních dat cenné údaje nejenom o krystalografické mříži (Obr. 3), ale i o vlastní struktuře stavebních částic mříže (atomů, fragmentů či molekul; Obr. 4). Tato metodika stojí za úspěšným určením struktury nejenom četných významných materiálů (supravodičů, katalyzátorů, apod.), ale i biologicky významných molekul jako např. peptidů, penicilínu či vitamínu B₁₂.



Obr. 3. Část krystalografické mřížky chloridu sodného.



Obr. 4. Část struktury MOF s mědi
a kyselinou 1,3,5-trikarboxybenzenovou.