

Mineralogická krystalografie

Jana Žďárská

Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8; zdarskaj@fzu.cz

Krystalografie umožňuje analýzu krystalové struktury krystalů a je velmi důležitá pro mnoho dalších vědních oborů, jako jsou chemie, biochemie, geologie či biologie. Rozplétání složitých krystalických struktur a objevování nových minerálů je důležitou oblastí vědeckého výzkumu. Mgr. Jakub Kopecký Plášil, Ph.D., z Fyzikálního ústavu AV ČR byl nyní za tento výzkum oceněn cenou Evropské mineralogické unie. K tomu říká: *„Je stále složitější dosáhnout takového objevu, kterému bychom mohli říct bez příkras ‚velký‘, protože neprozkoumaného prostoru rapidně ubývá. Ty velké, přelomové objevy, jako jsou radioaktivita nebo vlnová funkce, se už uskutečnily. Nyní skládáme tu stejnou mozaiku jemněji, věnujeme se minuciózní práci a soustředíme se na menší a fajnovější detaily.“*

Jakub K. Plášil působí jako vedoucí vědecký pracovník Skupiny mineralogické krystalografie, která se zaměřuje na studium struktury a chemismu environmentálně důležitých minerálů. Jedná se často o přírodní hydratované soli kyslíkatých anorganických kyselin, které obsahují často těžké kovy, jako například Bi, Pb, Sb, nebo U či Th. Mezi další důležité objekty studia zmiňované vědecké skupiny patří struktury složitých sulfantimoničnanů a sulfoarseničnanů obsahujících těžké kovy, kupříkladu thallium či vizmut, a produkty jejich zvětrávání. Skupina se věnuje také řešení a upřesňování složitých krystalových struktur, a to zejména zdvojitých krystalů. Zabývá se též strukturní analýzou a popisem nových minerálů. Jakub K. Plášil je doposud autorem nebo spoluautorem více než 120 nových minerálů popsanych v přírodě. *„Mineralogie mě zaujala už jako malého kluka, když jsem našel svůj první vltavín, koukal po skalách a jejich rozličné barevnosti, navštívil poprvé mineralogickou sbírku v Národním muzeu. Minerály mě začaly fascinovat. Sice jsem na nějakou dobu v raném dospívání změnil obor, neboť jsem se chtěl stát profesionálním astronomem, nicméně prozřetelnost asi chtěla, abych se stal mineralogem,“* podotýká s úsměvem Jakub K. Plášil. *„Na Štefánikově hvězdárně jsem se seznámil s Davidem Rajmonem, což je absolutní geologie na PřF UK v Praze. Zabýval se planetologií a diplomoval u Petra Jakeše. David mě trochu postrčil dál k ‚šutrům‘ a já jsem zjistil, že je to vlastně asi to, co bych chtěl v životě dělat. Za to jsem mu nesmírně vděčný, byť on o tom asi ani neví. Bylo to z jeho strany zcela nenucené – ale pravděpodobně nutný impuls k nastoupení mé další dráhy.“*

Jakub K. Plášil získal za svoji výzkumnou činnost významné ocenění Evropské mineralogické unie Research Excellence Medal za rok 2024. *„Já jsem to ani nečekal, protože se nevěnuji úplně věcem, které jsou, jak se dneska říká, v kurzu. Ocenění považuji především za uznání české krystalografie a mineralogie, protože tento obor tu má velmi dlouhou tradici již od druhé poloviny 19. století. A já jsem moc rád, že v tom*



Obr. 1 Minerál čejkait na vzorku z Jáchymova. Čejkait je uranyl-karbonát tetrasodný, bezvodý. Pojmenován byl na počest Ing. Jiřího Čejky, DrSc., (který byl v letech 2012–2025 ředitelem Přírodovědeckého muzea NM v Praze), kolegy, přítele a spoluautora studií o uranových minerálech. Skutečná struktura čejkaitu byla objasněna Jakubem K. Plášilem v roce 2013. Horizontální rozměr fotografie odpovídá 4,5 mm. Foto: Stephan Wolfsried

mohu pokračovat, rozvíjet a dělat to, čemu věřím, že dává smysl,“ doplňuje mladý vědec. *„Dělám klasickou krystalografii a na první pohled není úplně každému zřejmé, že jde o mezioborový nebo multidisciplinární výzkum. Příliš neinzerujeme, že děláme kvalitní výzkum. Nemám to ve zvyku, a proto jsem ani nečekal, že si toho ve světě někdo všimne. Někdy je trošku konzervativnější přístup a vzdor potřebný už i proto, že obor mineralogie postupně na univerzitách mizí. A to je velká škoda. Mizí nám tím část know-how, část našeho společného vědění.“*

Jakub K. Plášil se zabývá zejména minerálními strukturami a strukturami anorganických látek. V rámci tohoto výzkumu řeší, proč, kde a za jakých podmínek minerály vznikají. Věnuje se též složitým strukturám minerálů známých mnoho let, jejichž strukturu se doposud nikomu z vědců nepodařilo vyřešit, ačkoliv metody pro jejich výzkum prodělaly během posledních 20 let obrovský vývoj. *„Tím, že*



Obr. 2 Minerál plášilit (dihydrát uranyl-hydroxy-síranu sodného) z dolu Blue Lizard, San Juan County, Utah (USA). Horizontální rozměr fotografie odpovídá 2,5 mm. Foto: Stephan Wolfsried

struktura zůstala neznámá, postrádáme poměrně důležitou informaci, která je klíčová pro pochopení a stanovení některých dalších fyzikálně-chemických vlastností, jako je například rozpustnost látek. Pro řešení struktur dnes využíváme i kombinace difrakčních metod, například rentgenovou a elektronovou, a měříme velmi, velmi malé krystaly do nanometrových velikostí v případě elektronové difrakce," vysvětluje Jakub K. Plášil.

Elektronová difrakce je metoda používaná pro stanovení struktury krystalických materiálů. Představuje alternativu k monokrystalické rentgenové difrakci, která je často omezena velikostí syntetizovaných krystalů. Elektronová difrakce umožňuje analýzu materiálů v nanoměřítku, což ji činí užitečnou pro vzorky, jejichž krystaly jsou pro jiné metody příliš malé, a umožňuje tak pochopení mnohých složitých fenoménů.

Tomu napomáhá i komplexní nástroj, který ve výzkumném oddělení strukturní analýzy již více než třicet let vyvíjí jeho kolega Václav Petříček, krystalografický program JANA. Tento program umožňuje vědcům výzkum a řešení velmi složitých, například tzv. modulovaných struktur. A takřikajíc zásobováním kolegy Petříčka složitými problémy napomáhá právě vývoji programu a usnadňuje tak práci desítkám krystalografů na celém světě. „Roky se snažíte odhalit, kde je zakopaný pes – jako je třeba složitě dvojčatění struktur nebo proč vzdoruje řešení složitá modulovaná struktura, která poskytuje velmi komplexní difrakční obrázek, na základě kterého jsme schopni tu strukturu vyřešit. Pak prostě dostanete nějaký nápad nebo přijdete na maličkost, která vám to celé pomůže odhalit...“, objasňuje Jakub K. Plášil.

Jedním z prvních mineralogů, který začal zkoumat struktury minerálů moderní rentgenovou difrakcí, je Anthony Kampf z Natural Museum of Los Angeles County, který objevil více než 350 minerálů. „Spolupracuji s ním dlouhodobě na měření optických vlastností minerálů, což dneska už málokdo umí. Nikdo se tomu moc nechce věnovat, jelikož to je pracná záležitost u optického mikroskopu. Musíte na to mít vycvičené oko a sedět u toho. Tony zase často využívá svých zkušeností krystalografie uranu,“ doplňuje Jakub.

Právě nové minerály mají často naprosto neočekávané struktury, které vykazují unikátní strukturní prvky. Ty pak bývají impulzem k důkladnějšímu studiu vlastností příbuzných struktur a látek. Jakub K. Plášil během posledních 12 let pomohl rozšířit skupinu známých minerálů síranů šestimocného uranu. Jsou to malé, žluté nebo oranžové krystaly, všechny vypadají stejně a nepracuje se s nimi lehce. Snad právě proto byly vzhledem ke složitosti charakterizace považovány ze stejné. „Původně bylo známo osm minerálů vyskytujících se v přírodě. Díky našemu výzkumu se ukázalo, že to není osm minerálů, ale 45 neuvěřitelně chemicky a strukturně odlišných látek (a to jistě není konečné číslo!),“ vysvětluje. „Už tušíme, proč se někde vyskytuje

Velmi vzácný a pozoruhodný minerál vysokýit ze žíly Geschieber v Jáchymově. Dlouze prizmatické krystaly (jehlice) zvláštního odstínu zelené barvy narůstají na silně zvětralý ryzí arsen. Vysokýit je jedním z nemnoha supergenních oxidických minerálů obsahujících ve struktuře čtyřmocný uran $U^{4+}[AsO_2(OH)_2]_4 \cdot 4H_2O$. Horizontální rozměr fotografie odpovídá 4 mm. Foto: Stephan Wolfsried



Obr. 3 Velmi vzácný a pozoruhodný minerál vysokýit ze žíly Geschieber v Jáchymově. Dlouze prizmatické krystaly (jehlice) zvláštního odstínu zelené barvy narůstají na silně zvětralý ryzí arsen. Vysokýit je jedním z nemnoha supergenních oxidických minerálů obsahujících ve struktuře čtyřmocný uran $U^{4+}[AsO_2(OH)_2]_4 \cdot 4H_2O$. Horizontální rozměr fotografie odpovídá 4 mm. Foto: Stephan Wolfsried



Obr. 4 Kulovité a polokulovité agregáty krystalů lepersonnitu-(Gd) z dolu Shinkolobwe v Demokratické republice Kongo (Afrika). Krystalová struktura tohoto minerálu byla odhalena týmem Jakuba K. Plášila teprve nedávno pomocí elektronové difrakce. Jedná se o velmi komplexní krystalovou strukturu s nepříliš jednoduchým složením: $[\text{Ca}_{0.5}\text{Gd}_{0.5}(\text{H}_2\text{O})_{18}(\text{OH})_{1.5}][\text{Gd}(\text{UO}_2)_{12}(\text{SiO}_3\text{OH})_2(\text{CO}_3)_4(\text{OH})_{10}\text{O}_2(\text{H}_2\text{O})_5]$. Horizontální rozměr fotografie odpovídá 1 cm. Foto: Stephan Wolfsried

nebo že některé vznikají z extrémně kyselých roztoků, zatímco jiné z takřka „pitné vody“. Za tímto úspěchem se ovšem skrývá dvanáct let systematického výzkumu, kdy kolegové v Americe sbírali a identifikovali vzorky, třídili ty se známými strukturami od neznámých, zatímco my jsme tady řešili struktury a měřili vibrační spektra. Tento výzkum ukázal, jak moc je tato systematická práce důležitá.“

Vědecký výzkum je hrazen z veřejných finančních prostředků a na jeho financování se tím pádem podílí každý z nás. Proto je velmi důležité, aby lidé věděli, čím se vědci zabývají, s jakými problémy se potý-

kají a jaké jsou těžce vydobyté výsledky jejich práce. Výsledky, které v konečném důsledku využíváme my všichni a jimiž jsme doslova obklopeni. Stačí pár minut po probuzení a přesvědčí nás o tom náš chytrý telefon, rychlovarná konvice, mikrovlnná trouba či adaptivní elektronika našeho vozu. „Jsem dalek toho, hodnotit přínos mého vědeckého působení pro celou společnost, podobně jako bych byl rezervovaný k tomu, kdybych měl jako překladatel z tibetštiny říci, proč je důležité přeložit Knihu mrtvých a jaký to má společenský význam. Věřím, že veliký, jinak bych to už dávno nedělal. Pracuji na problematice, kterou považuji za důležitou. „Vyhořelé“ nebo recyklované a následně opět použité jaderné palivo tady bude, ať chceme, nebo nechceme, ať si před tím zakrýváme oči, nebo ne. Pokud se tedy nerozhodneme, že je budeme posílat do vesmíru, aby se stalo součástí kosmického odpadu. Ale jak praví staré známé přísloví – vyhodíš ho dveřmi, vrátí se ti oknem. Pak nám spadne zpět v podobě meteoritu a jaderné bomby,“ uzavírá s lehkou nadsázkou náš rozhovor Jakub K. Plášil.

Mgr. Jakub Kopecký Plášil, Ph.D., je mineralog a krystalograf, věnuje se zkoumání krystalových struktur minerálů. Je absolventem PříF UK v Praze a PříF MU v Brně. Od roku 2012 působí jako vědecký a nyní vedoucí vědecký pracovník ve Fyzikálním ústavu AV ČR, kde se specializuje právě na zkoumání atomárního uspořádání minerálů a role molekulární vody a jejího vlivu na stabilitu daných látek. Je autorem nebo spoluautorem více než 280 původních odborných článků v mezinárodních časopisech a úspěšným řešitelem řady vědeckých grantů. Je také autorem či spoluautorem popisu více než 120 nových minerálních druhů objevených v přírodě. V roce 2011 pobýval u Thomase Armbrustera na univerzitě ve švýcarském Bernu. Během let absolvoval několik pracovních-studijních pobytů na známé University of Notre Dame v South Bend v Indianě (USA) ve skupině Petera C. Burnse. Působí či působil v redakčních radách vědeckých časopisů a několik let byl šéfredaktorem časopisu Journal of Geosciences, který vydává Česká geologická společnost a který je jediným impaktovaným tuzemským geologickým periodikem.

Za svůj přínos vědě byl oceněn v roce 2014 premií Otto Wichterleho (udělované mladým vědeckým pracovníkům AV ČR), uznáním jeho práce je také pojmenovaný a schválený minerál plášilit (hydratovaný uranyl-sulfát sodíku, 2014). V roce 2024 získal prestižní ocenění Evropské mineralogické unie Research Excellence Medal.

