

KRYSTALOGRAFICKÁ SPOLEČNOST

Jindřich Hašek¹, Radomír Kužel²

¹Biotechnologický ústav - BIOCEV, AV ČR, Průmyslová 595, 252 42 Vestec

²Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2

Organizace krystalografických aktivit

Význam strukturní analýzy vzrostl po druhé světové válce. Hned v roce 1945 byla v Praze uspořádána mezinárodní konference zabývající se studiem materiálů rtg. zářením. V roce 1948 byla založena též světová organizace – Mezinárodní krystalografická unie [IUCr](#) (*International Union of Crystallography*) – spadající pod ICSU. Československo bylo na prvním kongresu v Bostonu IUCr v roce 1948 jednou z pěti zakládajících zemí společně s USA, Velkou Británií, Norskem a Kanadou. Členství „Československého národního komitétu“ bylo původně garantováno Přírodovědeckou fakultou Karlovy univerzity, později tuto roli převzala Československá akademie věd (ČSAV).

První specializované setkání krystalografů bylo zorganizováno profesorkou Adélou Kochanovskou v roce 1954 na půdě ČSAV pod názvem „**Rozhovory o aktuálních otázkách studia jemné struktury materiálů ionizačním zářením**“. Tato obvykle jednodenní setkání se od té doby konají pravidelně několikrát ročně až do současnosti. V současné době pod názvem „Rozhovory o aktuálních otázkách rentgenové a neutronové strukturní analýzy“, zjednodušeně „Rozhovory“. Tyto [Rozhovory](#) hrály důležitou roli pro zavedení výroby kompletního vybavení pro rtg. strukturní analýzu firmou Chirana v padesátých letech minulého století. V letech 1972–1974 byly poprvé zorganizovány vícedenní pokročilé kurzy strukturní analýzy z iniciativy Allana Línea a Slavomila Ďuroviče. V roce 1975 byla skupinou Dr. Humla z ÚMCH AV ČR pod záštitou IUCr uspořádána desetidenní „International School of Crystallographic Computing“, čítající více než 200 účastníků. Aktivita probíhala většinou pod hlavičkou „Skupiny pro studium materiálů ionizačním zářením Československé vědecko-technické společnosti“.

Počínaje rokem 1980 tato „skupina“ začala každoročně organizovat pravidelné krystalografické konference (obvykle 5 dní, 80–100 účastníků, sborník 200 stran) a začala pravidelně rozesílat svým členům „Krystalografický bulletin“ s informacemi o nových událostech v oboru.

Krystalografická společnost - vznik

Iniciativa k pořádání společných akcí v letech 1953–1959 vycházela z Ústavu technické fyziky ČSAV. Později, v období 1959–1991, byly tyto aktivity zastřešeny Československou vědeckotechnickou společností (VTS). V posledních dvaceti letech akce organizuje Krystalografická společnost. Přípravy k založení Krystalografické společnosti jako samostatné právnické osoby probíhaly již od roku 1986, ale k jejímu formálnímu schválení na Ministerstvu vnitra došlo až 6. 2. 1991.

Historicky byly aktivity krystalografické komunity organizovány dominantně dvěma lidmi – předsedou a tajemníkem (1954–1966 A. Kochanovská, F. Kohl, 1966–1975 A. Kochanovská, K. Melka, 1975–1978 A. Línek, M. Nehasil, 1978–1984 A. Línek, J. Hašek, 1984–1989 J. Hašek, V. Valvoda, 1989–1992 J. Hašek, R. Černý – vznik Krystalografické společnosti, a od roku 1992 J. Hašek a R. Kužel). Počet členů Krystalografické společnosti (350 registrovaných) se v historii příliš neměnil, ale počet pracovišť v posledních letech poklesl ze 74 na cca 50.

Krystalografická společnost - cíle, oblast zájmů

Krystalografická společnost podporuje rozvoj vědy a výzkumu ve všech oblastech analýzy struktury materiálů, kde je využíváno rozptylu a difrakce elektromagnetického vlnění (světla, rtg záření, synchrotronového záření, elektronů, pomalých neutronů, atd.). Z hlediska klasického dělení vědy rtg strukturní analýza zasahuje prakticky celou šíři přírodních věd, tj. oblasti fyziky, geofyziky, technologie materiálů, organickou a anorganickou chemii, polymery, biochemii, molekulární biologii, racionální vývoj nových nanomateriálů, návrh nových léčiv, nové technologie zpracování potravin, atd.



298. Rozhovory, Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha, 6. 11. 2015.



Jiří Kulda, ILL Grenoble, Francie
292. Rozhovory



David Havlíček,
Přírodovědecká fakulta UK v Praze



Pavel Vojtíšek,
Přírodovědecká fakulta UK v Praze



Marian Koman,
Fakulta chemickej a potravinárskej
technológie STU, Bratislava

Z 292. Rozhovorů

Ve vědě o materiálech a technologiích jsou krystalografické metody využívány například pro sledování poruch a napětí v materiálech, pro charakterizaci tenkých vrstev vytvářených pokročilými technologiemi, sledování dislokací, určování složení a původu materiálů.

V chemii jsou difrakční metody ceněny zejména jako analytický nástroj, protože kompletní určení struktury (prostorové rozložení atomů v molekule s přesností na desetitisíciny nanometru včetně automatického stanovení chiralit a konformační variability) je možné získat za jediný den s využitím nepatrného množství měřeného materiálu (setiny miligramu).

Proteinová krystalografie, která v posledních 20 letech dokázala stanovit téměř 40 tisíc struktur proteinů způsobila doslova převratný rozvoj molekulární biologie založený na skutečné znalosti procesů na molekulární úrovni. Například, detailní popis struktury ribozomu umožnil pochopit a popsat celý proces tvorby nových proteinů podle genetické informace čtené z DNA.

Kromě zobrazování rovnovážného stavu makromolekul v jejich funkčním a plně hydratovaném stavu jsou rtg strukturní analýzou zobrazovány prostorové struktury reakčních mezistavů, které v mnoha případech korigují představy o průběhu katalyzovaných reakcí a umožňují tak cíleně modifikovat funkci těchto vysoce účinných molekulárních strojů. Zdroje synchrotronového záření nyní umožňují sledovat procesy v desítkách ps. Očekává se, že nově testované pulsní zdroje záření "free electron laser" umožní "snímkování" okamžitých stavů molekuly v oblasti femtosekund.

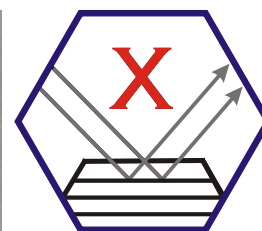
Významnou součástí krystalografie - jako významné analytické metody - je shromažďování všech experimentálních výsledků v počítačově snadno zpracovatelné formě. Proto se společnost stará o dostupnost těchto databází a navazujícího softwaru v naší geografické oblasti. Jedná se zejména o Protein Data Bank (www.RCSB.com), databázi molekulárních struktur organických a metalo-organických sloučenin (CCDC), databázi anorganických sloučenin, databázi kovových systémů, databázi práškových difrakčních materiálů pro fázovou analýzu, krystalizační databáze, proteinovou strukturní atd).

Atributy společnosti

Znak Krystalografické společnosti byl vybrán na kolokviu v Malé Morávce na základě konkurzu vyhlášeného v lednu 1988. Vítěz konkurzu Z. Zikmund ve znaku zobrazil šestičetnou symetrii a difrakci paprsků X na rovinách krystalu. Znak má mnoho zdařilých variant vytvořených ku příležitosti významnějších konferencí R. Kuželem a L. Dobiášovou. Na kolokviu v Herlanech u Košic bylo na jaře 1991 uměleckou dílnou T. Havlík, F. Eichler, M. Petrák vytvořeno cechovní právo („žezlo Krystalografické společnosti“) z rtg. lampy Chirana a čtyř monokrystalů minerálů (křemen z Žulové ve Slezku, amfibol z Valeče v Doupovských vrších, kalcit z rudných dolů a pyrit z dolů ve Vintířově). Cechovní právo bylo poprvé použito k pasování „rytířů krystalografie“ na kolokviu ve Vojtěchově v květnu 1992 (rytířka Dagmar Krausová). Dalším orgánem příslušným IUCr je **Regionální komitét českých a slovenských krystalografů**. Ten je jmenován Akademií věd ČR na návrh vědecké rady Krystalografické společnosti a je složen ze čtyř členů z ČR a čtyř členů ze SR. V uplynulém období byl řízen Marianem Komanem (Slovenská technická univerzita, Bratislava), nyní R. Kuželem. Komitét těsně spolupracuje s Krystalografickou společností a většina schůzí je společných s její vědeckou radou.



Zdeněk Zikmund, autor znaku
Krystalografické společnosti



Současná barevná verze
loga KS

Insignie - pravidla a způsob použití

Insignie je nejvyšší symbol krystalografické společnosti a vykonává funkci cechovního práva.

Opatrovníkem, správcem a osobou odpovědnou za používání insignie je úřadující prezident společnosti. Je povinen insignii milovat, chránit před zneužitím a uchovávat na chladném a suchém místě.

Členové krystalografické společnosti jsou povinni prokazovat insignii přiměřenou úctu a chránit ji před zneuctěním. Poctivý nálezce opuštěné insignie je za její navrácení do rukou opatrovníka odměněn. Doporučuje se převést odměnu do skupenství kapalného.

Pro styk s insignií platí zvláštní pravidla:

1. v okruhu dvou metrů je zakázáno požívat potraviny, nápoje, kouřit a řešit národnostní problémy.
2. je zakázáno líbat insignii na beryliová okénka.
3. je zakázáno mechanicky narušovat vákuum insignie podle hesla „nedotýkej se mého vákuu“.

Tato pravidla platí na věčné časy a nikdy jinak, minimálně však na jeden rok. Tato pravidla mohou být změněna pouze při výjimečné příležitosti a to zvláštní komisí, která se prohlásí za způsobilou tyto změny provést.

Ve Vojtěchově u Hvozdu na Moravě dne 20. 5. 1992



Handwritten signatures and text:
J. Hašek
M. Kužel

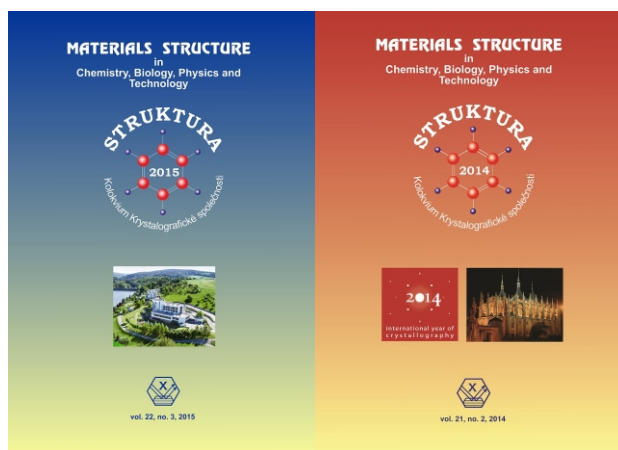
Předseda KS J. Hašek s insignií na konferenci Struktura 2015 v Luhačovicích

Současná organizace společnosti

Výkonný výbor řízený předsedou a tajemníkem je zodpovědný za svou činnost vědecké radě. Všechny orgány jsou voleny shromážděním na tři roky. Současným předsedou je Jindřich Hašek (Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha), tajemníkem je Radomír Kužel (Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha). Místopředsedy jsou Zbyněk Šourek (Fyzikální ústav AV ČR, Praha) a Ivana Kutá Smanová (Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích). Aktuální složení vědecké rady a řadu dalších informací lze nalézt na www.xray.cz. V roce 2015 byly přijaty nové stanovy, oficiální název společnosti se změnil na Krystalografická společnost, z. s. Volební období bylo prodlouženo na pět let.

Časopis společnosti

Bulletin Krystalografické společnosti vznikl v roce 1980. Původně byl tištěn v ÚMCH AV ČR počítačem a distribu-



ván spolu s pozvánkou na konferenci. Od roku 1984 byl reprodukován xeroxem a distribuován ve vázané podobě (formát A5). V letech 1986–1989 byl Bulletin tištěn ofsetem Z. Weisssem v Ostravě. V letech 1990–1993 se tisk vrátil do Prahy. V roce 1993 měl Bulletin o formátu A5 již příliš mnoho stran, a proto byl změněn formát na klasický vědecký časopis vydávaný v českém, slovenském a anglickém jazyce. Od roku 1994 tento nový časopis vychází pod jménem „Materials Structure in Chemistry, Biology, Physics and Technology“, ISSN 1211-5894 (Print), ISSN 1805-4382 (Online) až dosud. Formát letošního dvacátého prvního ročníku zůstává v podstatě stejný, jako byl v roce 1994. Šéfredaktorem je od roku 1994 stále Radomír Kužel.

Vědecké články podléhají recenznímu řízení. Časopis je „open access“ a všechny články jsou volně dostupné ve formátu PDF na adrese <http://www.xray.cz/ms>. Časopis je dostupný též z databáze volně dostupných elektronických časopisů Directory of Open Access Journals (<http://www.doaj.org/>). Ročně vychází 2–4 čísla. Přijímány jsou vědecké články z oblasti problematiky krystalové a reálné struktury materiálů, obecné články o krystalografii a rtg. strukturní analýze, přehledné články z této oblasti, recenze knih, zprávy o školách a seminářích, informace o rtg. a neutronových laboratořích, zprávy o novinkách v přístrojovém vybavení, počítačových programech, krátké zprávy. Primárně jsou publikovány texty vztahované k příspěvkům na konferencích pořádaných či spolupořádaných Krystalografickou společností.

Výroční konference – kolokvium

První kolokvium proběhlo v roce 1980 v Lysolajích (Beskydy). Do dnešní doby bylo zorganizováno již 30 těchto konferencí. V současné době jsou organizované pod názvem [Strukturaxxxx](http://www.xray.cz/struktura), kde xxxx je příslušný rok. Konference jsou věnovány difrakčním a nedifrakčním technikám a metodám strukturních studií, aplikacím difrakčních metod v praxi, užití technik v materiálovém výzkumu, fyzice, chemii a biologii. Jsou organizovány každoročně na různých místech v Čechách a na Moravě buď v menších městech či spíše v přírodě, jsou obvykle multitematické, ale uskutečnilo se též několik specializovaných setkání obsahujících souhrnné přednášky zvaných hostů. Například „Experimentální metody v rtg. a neutronové analýze“ (zámek v Bechyni 1981, VŠB Ostrava 1994, Ostravice 2002), „Výpočetní metody“ (Visalaje 1980, Chlum u Třeboně 1983, Stará Lesná 1986, Herlany 1991, Nové



Exkurze u synchrotronu v ESRF během kolokvia Struktura 2006.

Hrady 2003, Klatovy 2012). Sborníky z těchto specializovaných konferencí obsahují dlouhé příspěvky (review) zvaných přednášejících a dávají tak přehled o současném stavu problematiky.

Dvě kolokvia byla věnována synchrotronovému záření, resp. neutronovému rozptylu. První konference zaměřená výhradně na synchrotronové záření byla uspořádána v roce 2006. Osmdesát účastníků jelo dvěma autobusy do Grenoblu, se zastávkou a exkurzí ve Villigen u švýcarského synchrotronu. Samotné kolokvium se uskutečnilo přímo u synchrotronu ESRF (*European Synchrotron Radiation Facility*) a neutronového zdroje v ILL (*Institute Laue-Langevin*). Další kolokvium s tematikou synchrotronového záření bylo organizováno ve Valticích na jižní

Moravě a bylo spojeno s plánovaným projektem synchrotronu v Brně CESLAB (*Central European Synchrotron Laboratory*), který byl pak bohužel zastaven.

Kurzy pořádané na těchto kolokviích jsou často organizovány paralelně, např. pro biokrystalografy a účastníky zaměřené spíše na práškovou difrakci a materiálové vědy. Některé kurzy jsou zaměřené na specifický software (strukturní databáze, programy Jana, Maud, FOX), na řešení a zpřesňování struktur, na stanovení parametrů reálné struktury. Část přednášek bývá organizována paralelně, ale více než polovina programu bývá vždy společná pro všechny účastníky (plenární a obecněji zaměřené přednášky). Důležitou součástí jsou komerční přednášky prezentující nejnovější vývoj v experimentální technice. Účast na výročních kolokviích se dlouhodobě pohybuje v rozmezí 70–100 lidí.

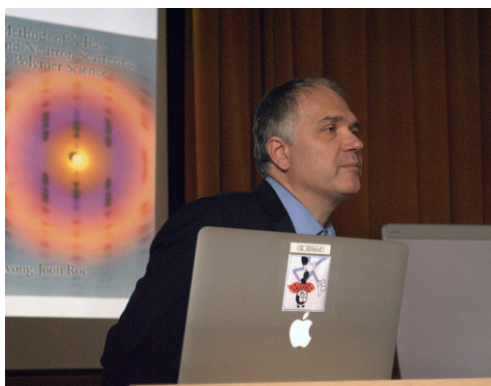
V roce 2014 bylo kolokvium v Kutné Hoře věnováno Mezinárodnímu roku krystalografie a přehledu aplikací krystalografie a strukturní analýzy v nejrůznějších oblastech. Kolokvium bylo zahájeno starostou města, bývalým krystalografem, I. Šancem a v jeho rámci proběhla i exkurze do místního stříbrného dolu. V roce 2015 se konalo v Luhačovicích a obsahovalo studentskou přehlídku i rychlý kurs použití grup v krystalografii a větší pozornost byla věnována strukturním databázím. Na září roku 2016 se chystá Struktura 2016 do Tábora a bude částečně věnována aplikacím různých nedifrakčních metod ke studiu struktury a mikrostruktury.



Z kolokvia Struktura 2013 v Českovicích



Václav Petříček
Fyzikální ústav AV ČR



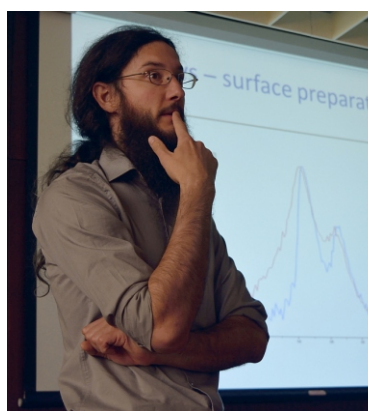
Jan Ilavský,
Argonne National Laboratory, USA



Václav Holý,
MFF UK Praha

Peter Laggner, Bruker


Z kolokvia Struktura 2015 v Luhačovicích

Miroslav Šlouf
Ústav makromolekulární chemie
AV ČR, Praha

Jan Drahokoupil
Fyzikální ústav AV ČR, Praha

Edmund Dobročka (Elektrotechnický ústav SAV,
Bratislava), Milan Dopita (MFF UK Praha)


Jan Gertenbach, Panalytical


Tomáš Roch
MFF UK Bratislava

Robert Uhrecký
Ústav anorganické chemie
AV ČR, Řež u Prahy

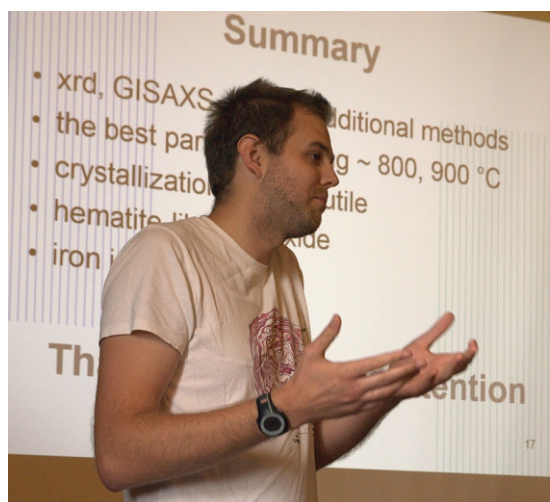
Studentská přehlídka

Přehlídka studentských prací z oblasti krystalografie a strukturní analýzy vznikla na Fakultě jaderné a fyzikálně inženýrské ČVUT. Od třetího ročníku je pak pravidelně pořádána na kolokviích „Struktura“ každý druhý rok. Účastní se jí studenti doktorského a magisterského, někdy i bakalářského studia z různých vysokých škol z Česka i ze Slovenska, obvykle v počtu 15–25. Své práce prezentují v patnáctiminutových referátech s následnou diskusí a dodávají také abstrakty či rozšířené recenzované abstrakty publikované v *Materials Structure*. Příspěvky jsou hodnoceny zvláštní komisí (čítající i přes deset členů) a nejlepší práce jsou odměněny. Jedním z nejlepších studentů těchto přehlídek byl Lukáš Palatinus (FZÚ AV ČR), později odměněný i cenou Félix Lewy-Bertaut Evropské krystalografické asociace (ECA) na ECM v Istanbulu 2009.

Poslední dvě přehlídky byly rozděleny do dvou kategorií: Biokrystalografie a chemická krystalografie a Fyzika a materiálové vědy.



Ze studentské přehlídky 2015. Zleva dva předsedající: Bohdan Schneider (Biotechnologický ústav AV ČR, Praha), Ľubica Urbániková (Ústav molekulární biologie SAV, Bratislava).



Václav Valeš,
Matematicko-fyzikální fakulta UK v Praze



Gabriel Demo,
Masarykova univerzita v Brně

**Nejúspěšnější studenti studentské přehlídky v
Českovicích, září 2013**

Jana Písačková,
Ústav molekulární genetiky



Jakub Rozbořil,
Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita v
Brně



Eliška Škořepová
VŠCHT v Praze



Daniela Jamrichová
Fakulta přírodních věd, Univerzita ss
Cyrila a Metoda v Trnave

**Nejúspěšnější studenti v přehlídce
v Luhačovicích, červen 2015**



Iulia Iermak
Jihočeská univerzita v
Českých Budějovicích



Jana Šmilauerová
MFF UK v Praze



Cinthia Antunes Correa
Fyzikální ústav AV ČR,
Praha



Petr Cejpek
MFF UK v Praze



Z konference XII. Discussions v Nových Hradech, březen 2014.

Další pravidelné konference

Od samého počátku tedy jara 2002, spoluorganizovala Krystalografická společnost Setkání strukturních biologů, které se koná pravidelně v březnu v Akademickém a univerzitním centru v Nových Hradech.

Letos se uskutečnilo již čtrnácté. V současné době probíhá konference v angličtině pod názvem *Discussions in Structural Molecular Biology*. Tato setkání jsou tematicky orientovaná na všechny aspekty strukturní molekulární biologie včetně krystalografie, NMR, elektronové mikroskopie, hmotnostní spektrometrie, spektroskopických metod, bioinformatiky, termodynamiky a počítačových simulací. V roce 2010 byla založena Česká společnost pro strukturní biologii (www.structbio.eu) a stala se hlavní organizátorkou této konference, která je také její výroční. Konference je hojně navštěvovaná, zejména studenty. Účast v posledních letech překročila číslo 120. Předsedou konference je od počátku B. Schneider (Biotechnologický ústav AV ČR, Biocev).

Od roku 2004 jsou na stejném místě organizovány FEBS kurzy pokročilých metod v krystalizaci makromolekul (*Advanced methods in macromolecular crystallization*), jako kombinace přednášek a praktik. Typicky se účastní až dvacet přednášejících a učitelů. Studenti přijíždějí především z Evropy, ale i z Asie a Ameriky. Jejich počet je omezen na 25, zejména z důvodu kapacity praktických cvičení. Letos v červnu se koná již sedmý kurs *Advanced methods in macromolecular crystallization VII*.

Účastníci FEBS kursu *Advanced Methods in Macromolecular Crystallization V*, červen 2012.

Hlavními organizátorkami jsou Ivana Kutá Smatanová (Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích) a Pavlína Řezáčová (Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha).

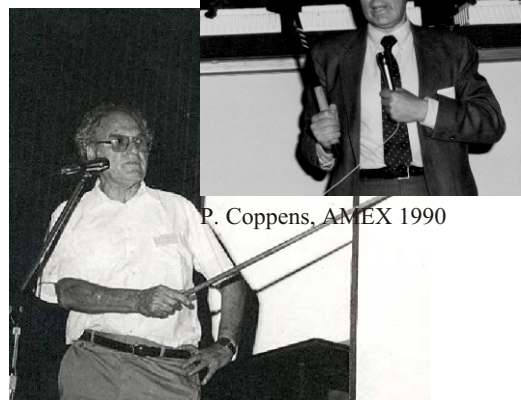
Pravidelně od roku 1998 probíhají studentské konference (přehledky Ph.D. prací registrovaných pracovišť – ÚOCHB a ÚMCH AV ČR, CSCA) *Heart of Europe Bio-Crystallography Meetings*, a to střídavě v Polsku, Německu a České republice (Bedřichov 2001, Karlovy Vary 2005, Třeš 2009). Hlavním organizátorem z ČR byla skupina z Ústavu molekulární genetiky AV ČR. V roce 2015 pořádala tuto konferenci Česká společnost pro strukturní biologii (předseda: Jan Dohnálek, Biotechnologický ústav AV ČR) v Kutné Hoře.

Malá regionální konference o práškové difrakci se konala řadu let až do roku 2009 většinou v Liptovském Mikuláši. Byla spíše pracovním setkáním, kde se diskutovaly různé praktické problémy (www.saske.sk/RPDK/).

Mezinárodní konference

Série mezinárodních konferencí organizovaných od osmdesátých let v Československu začala konferencemi *Advanced Methods in X-ray Structure Analysis* (AMEX) (Karlovy Vary 1987; Praha 1990), které k nám přivedly řadu významných zahraničních krystalografů.

Největší z akcí pořádaných Krystalografickou společností byla evropská konference **ECM-18** (*European Crystallographic Meeting*) 16.–20. srpna 1998, která se konala v budovách ČVUT v Praze-Dejvicích. V celé 36leté historii pořádání ECM paří konference v Praze k několika

M. A. Krivoglaz,
AMEX 1987

P. Coppens, AMEX 1990

Nositel Nobelovy ceny, H. Hauptman, AMEX 1990



ECM-18, sekce Structure and function in molecular biology, vlevo J. Hašek, předseda konference.

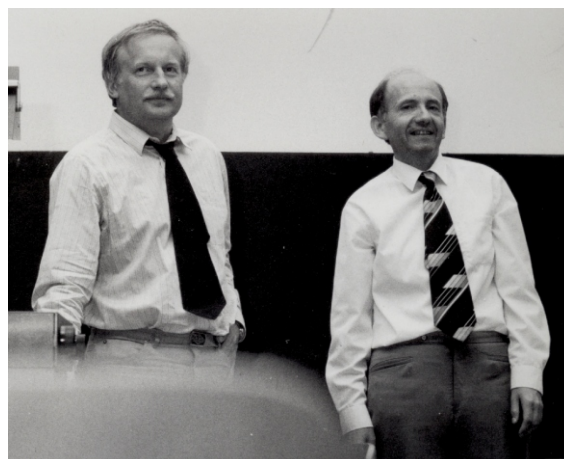


ECM-18.

Z koncertu na schodech v Národním muzeu.

málo ECM, které přitáhly zájem více než tisíce účastníků. Celkem 1 100 aktivních účastníků přijelo z 39 zemí celého světa. Nejvíce bylo z Německa (185), Velké Británie (109), Ruska (80), Francie (80), České republiky (70), Polska (50), Itálie (41), USA (41) a Švédska (40). Předsedou konference byl J. Hašek, tajemníkem R. Kužel. Konference byla organizována v sedmi paralelních sekcích zaměřených do oblastí: fyzika a aplikovaná krystalografie, materiálová věda, strukturní aspekty v chemii a chemická krystalografie, struktura a funkce biologických systémů, pokročilé metody pro strukturní výzkum, metody pro určování biologických struktur, obecná krystalografie. Program sestával z 18 plenárních přednášek a 240 dalších ústních příspěvků prezentovaných ve 48 mikrosymposiích. 558 příspěvků bylo prezentováno ve formě posterů.

Před konferencí bylo zorganizováno pět workshopů o symetrii krystalů, metodách řešení struktur, využití strukturních databází. Finančně jsme podpořili 200 studentů. V rámci konference se konalo ve Státní opeře shromáždění k 50. výročí IUCr, řízené tehdejšími prezidentem IUCr profesorem Tedem Bakerem. Kulturní program zahrnoval koncert k 25. výročí ECM na schodech Národního muzea, výstavu Struktura mikrosvět v Národním muzeu (otevřena pro veřejnost následující tři měsíce), koncert v Karolinu k výročí 650 let od založení Univerzity Karlovy a hudební představení u Křižkovy fontány.

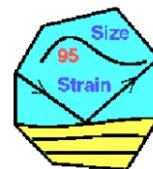


V. Valvoda (vlevo) a J. Fiala (vpravo).

Informace o konferenci lze stále nalézt na www.xray.cz/ecm. Po konferenci byla vydána kniha *Advances in Structure Analysis*, obsahující vybrané recenzované příspěvky (dostupná na požádání). Po konferenci bylo rozesláno všem účastníkům i CD s bohatým obsahem (viz výše uvedené stránky).

Konference Size-Strain IV

Ideu konference *Size-Strain* přinesl dlouholetý místopředseda společnosti prof. Jaroslav Fiala. Konference měla především zdůraznit úlohu tzv. reálné struktury materiálů a její charakterizace pomocí rtg. difrakce. První konference byla pořádána Krystalografickou společností v roce 1995 na Slovensku v Liptovském Mikuláši na Vojenské akademii (místní organizátor P. Šutta). Z konference vznikla monografie, vydaná v řadě IUCr Oxford series a redigovaná R. Snyderem, H. J. Bungem a J. Fialou (*Defect and Microstructure Analysis by Diffraction*, Oxford University Press, NY 1999). Tato konference se nyní pravidelně opakuje v různých zemích. Obvyklá účast se pohybuje v rozmezí 100–150 lidí.



9th European Powder Diffraction Conference (EPDIC IX) byla uspořádána Krystalografickou společností v Praze v roce 2004. Tradiční schéma konference sestává z šesti plenárních přednášek a dvou paralelních sekcí. Postery jsou vystaveny po celou dobu. Hlavní témata: řešení struktur z práškové difrakce, zbytková napětí a textury, neutronová difrakce, fázové transformace, difrakce za nestandardních podmínek, fázová analýza, struktura a vlastnosti biomateriálů, nanokrystalické materiály, kovy a slitiny, minerály, tenké vrstvy, přístrojové techniky, indexace práškových difraktogramů. Konference obsahovala workshop o softwaru pro analýzu reálné struktury a pro fázovou analýzu. Předsedou konference byl R. Kužel, tajemnicí P. Řezáčová. Společenský program zahrnoval úvodní večer v Kongresovém centru s koncertem pěveckého sboru gymnázia Na Zatlance (Z-band) a přednášku vítěze ceny EPDIC Vincenta Favre-Nikolina. Poslední den konference





Atrium Stavební fakulty ČVUT během konference EPDIC IX.

byl objednáán zvláštní konferenční vlak do Plzně, kde kromě závěrečné večeře proběhly i exkurze do pivovaru. Na konferenci dorazilo více než 320 účastníků z 36 zemí světa (vice na www.xray.cz/epdic). Zhruba 100 šestistránkových recenzovaných příspěvků bylo publikováno v *Zeitschrift für Kristallographie (open access)*.

Konference **XTOP** (7th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging) se konala v kongresovém centru Průhonice a navazovala na EPDIC IX.



XTOP, A. Lang při oslavě narozenin.

Tematicky byla zaměřena na teorii rtg rozptylu, difrakci s vysokým rozlišením, reflektivitu, tzv. *grazing-incidence* rozptyl, tenké vrstvy a nanostruktury, topografie, rtg. zobrazovací techniky a přístrojové vybavení. Vědecký program obsahoval 9 zvaných přednášek, 34 dalších ústních příspěvků a 104 posterů. Během konference oslavil známý profesor Andrew Lang, jeden z průkopníků rtg. topografie, svoje osmdesátiny. Předsedy konference byli V. Holý (MFF UK) a Z. Šourek (FZÚ AV ČR). Recenzované plnohodnotné články vybraných přednášek vyšly ve zvláštním čísle *Journal of Physics D*. Celkem se konference zúčastnilo 147 delegátů z 16 zemí tří kontinentů.

Workshopy o Mezinárodních krystalografických tabulkách byly pořádány v letech 1993 a 1998 a vedeny autory těchto tabulek prof. Hansem Wondratschkem a prof. Theo Hahnem.



Účastníci workshopu o Mezinárodních krystalografických tabulkách v roce 1993 v ÚMCH AVČR v Praze na Petřínách.

Významná specializovaná konference **Aperiodic 2015** se konala v roce 2015 v Břevnovském klášteře. Hlavními organizátory byli M. Dušek a V. Petříček (FZÚ AV ČR).

Konference byla věnována aperiodickým a modulovaným strukturám a zúčastnilo se jí 130 účastníků z 30 zemí celého světa. Hlavní přednášku měl Ted Janssen. Celkem zazněly příspěvky v 64 přednáškách a bylo prezentováno 49 posterů.

Na rok 2016 se chystá konference **ICCBM-16** (International Conference on Crystallization of Biological Macromolecules) do Prahy a **XTOP-2016** (X-ray topography and high resolution) do Brna.



Z konference Aperiodic 2015.



Účastníci konference Aperiodic 2015.

Aktivity českých a slovenských krystalografů v mezinárodních organizacích

Do Mezinárodních krystalografických tabulek (International Tables for Crystallography) na pozvání přispěli: Vol.A (2006), Space group symmetry, Chapter 9.3. Further properties of lattices, **B. Gruber**.

Vol.C (2004), Mathematical, physical and chemical tables, Chapter 4.1 Radiations used in crystallography, **V. Valvoda**.

Vol.C (2004), Mathematical, physical and chemical tables, Chapter 9.2. Layer stacking, **S. Ďurovič**, P. Krishna and D. Pandey.

Vol. E: Subperiodic groups (2002). **V. Kopský** and D. Litvin.

V letech 2006-2012 pracoval **R. Kužel** ve výkonném výboru ECA (European Crystallographic Association) a **I. Kutá Smatanová** tři roky ve výboru FEBS (Federation of European Biochemical Societies). V komisích IUCr pracují: Aperiodické krystaly (**M. Dušek**), Mezinárodní tabulky, Krystalografická nomenklatura (**V. Kopský**, **M. Dušek**), Powder Diffraction (**L. Smrček** a **D. Rafaja**), Biologické makromolekuly (**B. Schneider**), Krystalografické výpočty, Elektronová krystalografie (**L. Palatinus**), Krystalografie v umění a kulturním dědictví (**P. Bezdička**), Magnetické struktury (**V. Petříček**), Nábojové, spinové a momentové hustoty (**J. Kožíšek**).

R. Kužel byl v roce 2014 zvolen na šest let do výkonného výboru IUCr. **I. Kutá Smatanová** je prezidentkou mezinárodní organizace pro biologickou krystalizaci (IOBCr).

Dlouhodobá snaha o získání světového krystalografického kongresu IUCr do Prahy byla nakonec v roce 2014 na kongresu v Montrealu úspěšná. Soupeřem Prahy

Čestní členové Krystalografické společnosti

Prof. Eugene Garfield (USA)	
Prof. Hans Wondratschek (Germany)	
Prof. Theo Hahn (Germany)	
Prof. RNDr. Martin Čermohorský, CSc.	Prof. prom. geol. Milan Rieder, PhD.
Prof. RNDr. Václav Janovec, CSc.	RNDr. Milena Polcarová, CSc.
Prof. RNDr. Jaroslav Fiala, CSc.	RNDr. Jan Čermák, CSc.
Prof. RNDr. Ivo Kraus, CSc.	Doc. RNDr. Josef Kuběna, CSc.
Prof. RNDr. Josef Loub, CSc.	Ing. Slavomil Ďurovič, CSc.
Doc. RNDr. František Hanic, DrSc.	Doc. RNDr. Pavol Šutta, PhD
RNDr. Antonín Fingerland, CSc.	RNDr. Jaromír Hrdý, DrSc.
RNDr. Václav Petříček, CSc.	RNDr. Zbyněk Šourek, CSc.
Prof. RNDr. Pavla Čapková, DrSc.	

byla Paříž a v historicky prvním elektronickém hlasování Praha získala hlasy 68 delegátů z celkového počtu 83 ze všech kontinentů a jubilejní 25. kongres byl přidělen na rok 2020 do Prahy (www.iucr25.org).