



## KRYSTALOGRAFICKÁ SPOLEČNOST

### Stručný přehled činnosti v roce 2000

V roce 2000 byly uspořádány tradiční Rozhovory a konference RPKD.

### Rozhovory, konference

V rámci "Rozhovorů o aktuálních otázkách v rtg strukturní analýze" se konaly následující semináře:

#### 245. ROZHOVORY

##### Materiálový výzkum s využitím zdroje synchrotronového záření v Trieste

Ústav makromolekulární chemie, Praha, 13.1.

*Přednášky:*

S. Bernstorff: Scattering and Diffraction Experiments at ELETTRA. Third Generation Synchrotron Radiation Center in Trieste, Miloš Steinhart: High Pressure Small and Wide Angle Scattering Measurements (HP-SWAXS) at ELETTRA, J. Baldrian, M. Horký, M. Steinhart, S. Bernstorff, H. Amenitsch: Use of the Synchrotron Source in Material Science. Polymer Blends.

*Organizace:* J. Pleštil, J. Hašek

#### 246. ROZHOVORY

##### Pokroky v práškové difrakci

Chemickotechnologická fakulta STU, Bratislava, 28. 3.

*Přednášky:*

J. Fiala: Geometrie práškové difrakce, V. Kavečanský: Využití LeBailovho přístupu v procese vypresňování některých štruktúrnych parametrov hexaferokyanidov vzácnych zemín Rietveldovou metódou, R. Skála: Relaxace struktury nízkého křemene po dynamickém stlačení, V. Jorík: Vplyv pootočenía voľných atómových skupín v komplexoch na ich difrakčný obraz, A. Buchal: Porovnaní možnosti stanovení amorfního podílu v keramických vzorcích, M. Ďurík: Riešenie kryštálovej štruktúry monosacharidu s využitím minimalizácie potenciálnej energie a Rietveldovej metódy, P. Freundlich: Zpřesnění hodnoty teplotního parametru WC korekci na povrchovou nerovnost vzorku, L. Smrček: Nový způsob spracovania difrakčných dát: vlnková transformácia.

*Organizace:* L. Smrček, V. Jorík

#### 247. ROZHOVORY

Přírodovědecká fakulta UK, Praha, 22. 6.

*Přednášky:*

Část I: věnovaná životnímu jubileu profesora Milana Riedera, na sekci geologie, Ústavu geochemie, mineralogie a nerostných zdrojů

S. Ďurovič, T. Kogre, J. Hybler: Polytypismus cronstedtitu  $\text{Fe}_3(\text{Si},\text{Fe})_2\text{O}_5\text{OH}_4$ . Rentgenografická (XRD) a elektronografická (HRTEM) studia, M. Rieder: Klasifikace a nomenklatura slíd: pohledy ze zákulisí, M. Drábek, M. Rieder, M. Mellini, Z. Weiss: Cs-slídy, jejich krystalová struktura a možné využití při ukládání některých radionuklidů, L. Palatinus: Zpřesnění struktury seladonitu, P. Čapková: Struktura interkalovaných fylosilikátů, Z. Weiss: Využití modelování difrakčních záznamů pro hodnocení neuspořádanosti struktury kaolinitů.

Část II: na sekci chemie, katedře anorganické chemie

D. Havlíček, L. Dobiášová: Rtg. difrakční analýza atmosférických aerosolů, I. Císařová: Struktura snadno a rychle? První měsíce s měřením na CCD plošném detektoru, M. Šlouf: Experimentální určování atomových nábojů pomocí strukturní analýzy monokrystalů

Exkurze do rtg laboratoře k přístroji Nonius KappaCCD.

*Organizace:* Z. Weiss, I. Císařová

#### 248. ROZHOVORY

Fyzikální ústav AV ČR, Praha, 22. 11.

*Přednášky:*

M. Polcarová: Rentgenová difrakční topografie in situ s použitím synchrotronového záření: aplikace na bikrystaly Fe-Si, J. Hrdý: Rentgenová krystalová optika pro synchrotronové záření, Z. Šourek: Strukturní vlastnosti supermříží polovodičů AIIIbV studované rentgenovou difrakcí s vysokým rozlišením, M. Čerňanský: Metody jediné linie v analýze difrakčních profilů, V. Studnička: Stručný přehled využití rentgenové fázové analýzy v Laboratoři Rotan, J. Kub: Nový difraktometr HUBER s Göbelovým zrcadlem ve FZÚ AV ČR, V. Petříček: Řešení a upřesňování obtížných krystalových struktur, J. Hybler: Čtyřkruhový difraktometr Xcalibur ve FZÚ AV ČR, instalace a první zkušenosti.

Exkurze do Laboratoře Rotan k difraktometru HUBER s Göbelovým zrcadlem (Slovanka) a k čtyřkruhovému difraktometru Xcalibur (Cukrovarnická)

*Organizace:* Z. Šourek



## 10. Regionální konference o práškové difrakci - RPK-2000

Vojenská akadémia Liptovský Mikuláš, 20. 9. - 22. 9.

*Konference věnovaná životnému jubileu Prof. J. Fialy*

*Organizace:*

Kryštalografická spoločnosť, Ústav experimentálnej fyziky SAV, Košice, Katedra anorganickej chémie, CHTF, STU, Ústav anorganickej chémie SAV, Bratislava, Vojenská akadémia Liptovský Mikuláš, Jednota slovenských matematikov a fyzikov

*Přednášky:*

J. Fiala: Rtg difrakční topografie polykrystalických materiálů, L. Smrčok: Riešenie "organickéj" štruktúry z prášku? Nič ľahšie..., A. Buchal: Charakteristika a teplotní stabilita nitrídané vrstvy na austenitu, M. Čerňanský: Metody jedinej línie v profilovej analýze, V. Langer: Stanovení struktury  $-Al_2O_3$ , P. Fejdi: Vplyv morfológie kryštálov na prednostné usporiadanie práškového preparátu, V. Vávra: Stanovení chemického složení minerálů řady zirkonu pomocí práškové rtg difrakce; Kvantitativní fázová analýza elektrárenských popílků a jejich kompozitů, P. Šutta: Štruktúra tenkých Si vrstiev na keramických podložkách, D. Rafaja: Difrakce na dvojrozměrných motivech, T. Havlík: Aplikácia rtg difrakcie na reálne technologické procesy, D. Havlíček: Zkušenosti se "stolní aerosolovou komorou" v kvantitativní analýze práškovou difrakcí, L. Čaplovič: Sledovanie degradačných procesov v permanentných magnetoch, O. Pritula: Kvantitativná fázová analýza štandardov Portlandského slinku, S. Jurečka: Optimalizácia dekonvolúcie difrakčnej línie, R. Kužel: O určování tlouštěk tenkých vrstev pomocí rtg difrakce, A. Mišková: Aplikácia rtg difrakcie na prípravu CaO žiaruvzdorného materiálu v závislosti od doby mletia, D. Krausová: Problémy kvantitativního stanovení desoxyephedrinu v reálných vzorcích práškovou difrakcí, J. Walla: Polymorfizmus molekulových krystalů vybraných komplexních látek, M. Jergel: Multivrstvy pre rtg optiku s extrémne nízkou drsnosťou rozhraní, V. Jorík: Spresňovanie štruktúry komplexov  $[FeX_2(OPPh_3)_4]$   $[FeX_4]$ , (X=Cl, Br) s využitím techniky "rigid body", M. Ďurík: O spoľahlivosti  $R_{wp}$  pri modelovaní štruktúr, M. Škrobán: Štruktúra z práškových údajov: Rietveld a/alebo Sheldrick? J. Marek: Zobrazení ODF ve standardní projekci, Q. Jackuliak: K problematike stanovenia zvyškových napätí v tenkých vrstvách Si.

## Redakce společnosti

*Časopis společnosti*

(původně Bulletin Kryštalografické spoločnosti)

vychází pod jménem "Materials Structure in Chemistry, Biology, Physics and Technology", ISSN 1211-5894.

Vědecké články podléhají recenznímu řízení a jsou přijímány v angličtině, češtině či slovenštině. Redakční rada může zasláný příspěvek odmítnout, pokud se domnívá, že koncepčně nespadá do redakčního plánu.

*Newsletter IUCr*

na základě dohody s IUCr čtvrtletně rozesílá všem členům společnosti časopis "Newsletter IUCr", který je vyčerpávajícím zdrojem informací o všech aktivitách nám příslušné Mezinárodní krystalografické unie (IUCr).

*Knihovna společnosti*

časopisy - Acta Crystallographica: (A) Foundations of Crystallography, (B) Structural Science, (C) Crystal Structure Communications, (D) Biological Crystallography a Synchrotron Radiation, Journal of Applied Crystallography, Protein Science.

## INTERNET

Kryštalografická spoločnosť sa snaží o intenzívne využitie Internetu. Byla zaregistrována doména xray.cz.

Adresy WWW a FTP serverů:

<http://www.xray.cz>

<ftp://xray.cz>

Vyzývame všetky členy a ostatní zájemce, aby přispěli k zlepšení formy i obsahu. Přinejmenším tím, že nám oznámí odkazy na vlastní WWW stránky.

## Pracovní skupina Struktura a vlastnosti

zajištuje provoz krystalografických databází a zprostředkovává některé aktivity týkající se programového vybavení pro krystalografii a pro molekulární modelování.

Licence jsou pro jednotlivé produkty odlišné. V prvním přiblížení platí, že licence jsou platné pro nekomerční uživatele zaregistrované na počítači, kde je databáze instalována (FZÚ, ÚMCH, MFF, STU). Podrobnější informace lze získat u správců databází.

**Instalované databáze:** FZÚ (CSD, ICSD) - J.Fábry, ÚMCH (CSD, PDB, NDB, Polybase, protein software) - J.Hašek, MFF UK (PDF-2) R.Kužel, STU Bratislava (CSD) - M.Koman.

## Poděkování za práci pro Kryštalografickou spoločnosť

Předseda Kryštalografické spoločnosti děkuje všem, kteří se zasloužili o dobrý průběh akcí Kryštalografické spoločnosti v roce 2000. Zvláštní poděkování patří:

I. Císařové, L. Dobiášové, J. Fábrymu, V. Joríkovi, V. Kavečanskému, R. Kuželovi, J. Pleštilovi, L. Smrčokovi, Z. Šourkovi, P. Šuttovi, Z. Weissovi.



## Vědecká rada Krystalografické společnosti

Proběhly volby nové vědecké rady.

Dne 22. 6. volební komise ve složení: předseda Marian Čerňanský, členové Věra Šubrtová, Ludmila Dobiášová porovnávala hlasovací obálky se seznamem Krystalografické společnosti (všechny hlasy odpovídaly členům společnosti, nikdo nehlasoval dvakrát). Komise obdržela celkem 95 hlasovacích lístků. Všechny byly platné. Dále komise rozlepila obálky, vyjmula lístky, zlikvidovala obálky a sečetla hlasy. Předseda komise pak zveřejnil pořadí prvních 13 kandidátů s počtem obdržených hlasů (v závorce).

V abecedním pořadí:

- RNDr. Antonín Buchal, CSc. (56)  
Odbor strukturní a fázové analýzy,  
Ústav materiálového inženýrství VUT Brno
- RNDr. Ivana Císařová, Csc. (67)  
Katedra anorganické chemie,  
Přírodovědecká fakulta UK, Praha
- Prof. RNDr. Jaroslav Fiala, Csc. (80)  
ŠKODA Výzkum s.r.o., Plzeň
- Doc. Ing. Nikolaj Ganev, CSc. (55)  
Fakulta jaderná a inženýrská ČVUT, Praha
- RNDr. Jindřich Hašek, DrSc. (71)  
Ústav makromolekulární chemie AVČR, Praha
- RNDr. Jiří Hybler (47)  
Fyzikální ústav AVČR, Praha
- Ing. Matej Jergel, CSc. (39).  
Fyzikální ústav SAV, Bratislava
- RNDr. Radomír Kužel, CSc. (88)  
Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy,  
Praha
- RNDr. Václav Petříček, CSc. (52)  
Fyzikální ústav AVČR, Praha
- RNDr. David Rafaja, CSc. (51)  
Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy,  
Praha
- RNDr. Lubomír Smrčok, CSc. (59)  
Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava
- RNDr. Pavol Šutta, Csc. (64)  
Katedra fyziky, Vojenská akadémia,  
Liptovský Mikuláš
- Doc. RNDr. Zdeněk Weiss, DrSc. (67)  
Centrální analytická laboratoř,  
VŠB - Technická univerzita Ostrava

Rada na svém prvním zasedání opět zvolila za předsedu Krystalografické společnosti J. Haška a za místopředsedy J. Fialu a P. Šuttu. Tajemníkem je R. Kužel. Zápisy ze schůzí rady lze nalézt na <http://www.xray.cz/xray>.

V průběhu listopadu odstoupil z rady L. Smrčok a nahradil ho první náhradník

Doc. RNDr. Václav Holý, CSc.  
Katedra fyziky pevné fáze,  
Přírodovědecká fakulta Masarykovy university, Brno

## Sekretariát společnosti

Činnost Společnosti řídí sekretariát Společnosti ve složení:

### Předseda:

RNDr. Jindřich Hašek, DrSc.  
Ústav makromolekulární chemie AV ČR  
Heyrovského nám. 2, 162 00 Praha 6  
Tel. (02)-20403205  
Fax : (02)-367981  
E-mail : [hasek@imc.cas.cz](mailto:hasek@imc.cas.cz)

### Místopředseda:

RNDr. Pavol Šutta, CSc.  
Katedra fyziky, Vojenská akadémia  
Liptovský Mikuláš  
Tel: (07)-326021 1.617  
E-mail: [dunaj@cvt.stuba.sk](mailto:dunaj@cvt.stuba.sk)

### Místopředseda:

RNDr. Jaroslav Fiala, Csc  
ŠKODA Výzkum Plzeň, s.r.o.,  
Tylova 46, 316 00 Plzeň  
Tel. : (019)-7734335  
E-mail: [Jaroslav.Fiala@vsb.cz](mailto:Jaroslav.Fiala@vsb.cz)

### Tajemník

RNDr. Radomír Kužel, Csc  
Matematicko-fyzikální fakulta UK,  
Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2  
Tel. : (02)-21911394  
Fax : (02)-24911061  
E-mail : [kuzel@karlov.mff.cuni.cz](mailto:kuzel@karlov.mff.cuni.cz)

*J. Hašek, R. Kužel*