



KRYSTALOGRAFICKÁ SPOLEČNOST

Stručný přehled činnosti v roce 2002

V roce 2002 byla Krystalografická společnost pořadatelem či spolupořadatelem celkem 4 tradičních Rozhovorů, kolokvia Experimentální metody v rtg a neutronové strukturální analýze, 1. Setkání strukturálních biologů a 12. Regionální konference o práškové difrakci v Liptovském Mikuláši.

Rozhovory, konference

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

254. ROZHOVORY

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, Bratislava, 6. 2.

Stav a perspektívy výučby kryštalografie na vysokých školách

Přednášky: přehledy výuky kryštalografie na různých školách,

D. Barančok (FEI STU, Bratislava), A. Buchal (FSI VUT Brno), E. Čaplovič (MtF STU Trnava), J. Černák (PF UPJŠ, Košice), P. Fejdi (Prír.F. UK, Bratislava), J. Fiala (Západočeská univerzita, Plzeň), N. Ganev (FJFI UK, Praha), J. Kameníček (PřF UP, Olomouc), V. Kavečanský (Ústav experimentálnej fyziky SAV, Košice), M. Koman (FCHPT STU, Bratislava), R. Kužel (MFF UK, Praha), J. Marek (PřF MU, Brno), F. Pavelčík (Prír.F UK, Bratislava), S. Ďurovič (Ústav anorganickéj chémie SAV, Bratislava)

Viz zpráva v tomto čísle.

Organizace: M. Koman

255. ROZHOVORY

Západočeská univerzita v Plzni, 24. 10.

Přednášky

P. Zuna: Inženýrská akademie ČR, J. Rosenberg: Nové technologie – Výzkumné centrum v Západočeském regionu, J. Fiala: Materiály a jejich degradace na Výzkumném centru – Nové technologie, J. Hubka: Rtg analytická technika Bruker AXS, D. Šimek, R. Kužel, J. Kub, F. Kunc: Rtg strukturální studium texturovaných tenkých vrstev pomocí mapování recipročního prostoru. A. Buchal,

R. Foret: Hodnocení strukturální stability žáruvzdorných ocelí z rozšíření profilu rtg difrakcí. E. Bekker: Scanning Electron Microscope Quanta 200 FEI for Applications in Materials Science and Engineering. J. Marek, M. Kolega: Srovnávací měření textur na FJFI ČVUT a na NTC ZČU. P. Šutta: Mikrostruktura naprášených vrstev oxidu yttria s různým obsahem kyslíku. R. Čerstvý: Laboratoř rentgenové difrakce Katedry fyziky ZČU a její modernizace. J. Kasl, P. Zuna, J. Fiala: Reverzní procesy při rekrystalizaci

(příspěvky v tomto čísle)

Exkurze do nových laboratoří Výzkumného centra – Nové technologie.

Organizace: J. Fiala

256. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha, 25. 11.

Inhibition of Serine and Aspartic Proteases

Přednášky:

J. Hašek: Complex Study of HIV proteases, M. Jaskolski: Atomic Resolution Structures of Trypsin Inhibitors, G. Bujacz, N. Ziolkowska: Structural investigation of HIV-1 protease inhibitors, J. Brynda: High Resolution Structure of HIV1 Protease – Inhibitor Complex, T. Skálová: Structural and Energy Comparison of Ethyleneamine Inhibitor Binding to the Wild and Mutant HIV Proteases, K. Zimmermann: Soft Block Constraints in Energy Minimization – HIV protease experiments, E. Buchtelová: Product of Autoproteolytic Cleavage Found in the Active Site of HIV Protease by X-ray Crystallography, K. Huml: Computer Model of DNA B - poly(L-lysine) Interaction.

(abstrakty v tomto čísle)

Organizace: J. Hašek

257. ROZHOVORY

Materiálovo-technologická fakulta Trnava, 3. 12.

Přednášky:

K. Wetzig: Application on Analytical Electron Microscopy in Materials Research. I. Hrivnák: M-A (martenzit-austenit) komponent v konštrukčných oceliach. M. Čaplovičová: Využitie difrakcie konvergentného elektronového lúča v kryštalografii. M. Ožvold: Kovové multivrstvy pre spinovú elektroniku. M. Dománková: EELS spektroskopie a jej aplikácia pri materiálovej analýze CN ultratenkých vrstiev. T. Kuníková: Princíp a použitie difrakcie spätne odrazených elektrónov. S. Jurečka: Štúdium mikroštruktúry práškoveho CaCO₃ Rietveldovou metódou. L. Čaplovič: Štruktúra a vlastnosti elektrografitu.

Exkurze do laboratoří

Organizace: L. Čaplovič



Kolokvium - Experimentální metody v rtg a neutronové strukturní analýze

Ostravice, 17. - 21. 6.

Tradiční kolokvium s kursováním charakterem. Současný stav experimentálních technik ve strukturní analýze, jejich užití a možnosti pro získání informací o atomové struktuře materiálů v biologii, chemii, fyzice i mineralogii.

Hlavní témata: zdroje, detektory, monochromátory, prášková difrakce - příprava vzorků, difraktometrie, topografie polykrystalických materiálů, tenzometrie, textury, kvantitativní fázová analýza; monokrystalová difrakce - filmové metody, difraktometrie; krystalizace proteinů, kryokrytalografie, proteinová difraktometrie, rozptyl neutronů, malouhlový rozptyl, vícekrystalová difraktometrie, difúzní rozptyl, struktura povrchů a tenkých vrstev, difrakce za vysokých tlaků, vysokých a nízkých teplot, rtg holografie, magnetické struktury, modulované struktury, nábojové hustoty.

Hlavní přednášející: J. Brádlér (FzÚ AVČR, Praha), J. Kulda (ILL, Grenoble, Francie), N. Ganev (FJFI ČVUT, Praha), J. Marek (PřF MU, Brno), J. Hybler (FzÚ AVČR, Praha), M. Dušek (FzÚ AVČR, Praha), R. Kužel (MFF UK, Praha), Z. Weiss (VŠB Ostrava), J. Fiala (ŠKODA výzkum, Plzeň), J. Marek (FJFI ČVUT, Praha), P. Lukáš (ÚJF AVČR, Řež u Prahy), P. Strunz (ÚJF AVČR, Řež u Prahy), M. Steinhart (Univerzita Pardubice, ÚMCH AV ČR, Praha), V. Holý (PřF MU Brno), J. Kub (FzÚ AVČR, Praha), J. Hrdý (FzÚ AVČR, Praha), M. Polcarová (FzÚ AVČR, Praha), Z. Šourek (FzÚ AVČR, Praha), I. Kutá Smatanová (ÚFB JČU České Budějovice), P. Řezáčová (ÚMG AVČR, Praha), J. Brynda (ÚMG AVČR), J. Hašek (ÚMCH AVČR, Praha), E. Buchtelová (ÚMCH AVČR, Praha), M. Šlouf (ÚMCH AVČR, Praha), K. Prokeš (MFF UK, Praha), M. Dušek (FzÚ AVČR, Praha), D. Rafaja (MFF UK, Praha), Z. Bochníček (PřF MU Brno), A. Buchal (VUT Brno), M. Dopita (MFF UK Praha)

WWW stránky <http://www.xray.cz/xray/csca/kol2002/> (včetně konferenčních fotografií)

Počet účastníků: 92

Organizace: R. Kužel, J. Hašek, Z. Weiss, L. Dobiášová

Všechny abstrakty jsou publikovány v Materials Structure v. 9, number 1a (<http://www.xray.cz/ms/bul2001-2a.htm>).

Části také v čísle 1 a v tomto čísle.

11. Regionální konference o práškové difrakci - RPK-2002

Vojenská akadémia Liptovský Mikuláš, 18. 9. - 20. 9.

Přednášky:

M. Čerňanský: Difrakto-metrické určení hustoty dislokací v ocelových vzorkách, L. Čaplovič: Zmeny fázového zloženia v procese prípravy konštrukčnej keramiky, M. Kolega: Rtg. tenzometrie laserové zpevněné oceli 12050, R. Kužel: Studium submikrokrystalických látek pomocí

práškové difrakce a měřením difúzního rozptylu v prošlé vlně, V. Langer: Stanovení symetrie epitaxiálních tenkých vrstev TI-2201, M. Dopita: Difrakční studium tenkých vrstev AlN, J. Fiala: Hodnocení korozní odolnosti pomocí rtg. difrakce, D. Havlíček: Mineralogické složení tuhé frakce aerosolu na Milešovce a jeho srovnání s výškovými profily z Kopist u Mostu a Dlouhé Louky u Litvínova, D. Šimek: Měření a fitování map reciprokého prostoru, V. Jorík: Aktuálne výsledky z charakterizácie heterogénnych katalyzátorov práškovou difrakciou, O. Pritula: Kvantitatívna analýza zmesí čistých fáz Portlandského cementu. M. Lukáčová: Magnetizmus a štruktúra vybraných molekulárných magnetov, F. Glatt: Iontová nitridace austenitických ocelí, P. Sedlák: Experimentální studium zbytkových deformací ve vzorcích ocelí, J. Marek: Textury tenkých polykrystalických vrstev MgO chemicky nanesených na rovinnou podložku, M. Černík: Vplyv lisovania na texturu ocelových plechov, J. Bednarčík: Phase formation and properties of mechanically alloyed CoFe, S. Jurečka: Štúdium vývoja mikroštruktúry práškového CaCO₃ pri mletí vo vibračnom mlyne.

Počet účastníků:

Nová konferenční domovská stránka:

http://www.saske.sk/RPK/s_konferenčními_fotografiemi

Organizace:

V. Kavečanský, P. Šutta, L. Smrček, V. Jorík, R. Kužel

Krytalografická 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

1. Setkání strukturních biologů

Ústav fyzikální biologie, Nové Hrady, 14 - 16. 3.

Přednášky: J. Sedláček: Protein Crystallography at the Department of Gene Manipulations of Inst. Molecular Genetics I, J. Brynda: Protein Crystallography at the Department of Gene Manipulations of Inst. Molecular Genetics II, I. Barák: Differentiation and cell division in *Bacillus subtilis*: Genetic and structural studies of proteins involved, P. Flecker: Molecular recognition and misrecognition in complex molecular systems, L. Janda: Preparation of the actin binding domain of plectin for crystallization, T. Kubičárová: Structural biology of telomeres, R. Hrabal: NMR structural study of proteins from Mason-Pfizer monkey virus, P. Padrta: Structure Refinement of Nucleic Acids Using Very Small Residual Dipolar Couplings, M. Munzarová: A Quantum Chemical Study of the Structure-NMR Relationships in Nucleic Acids: Spin-Spin Coupling Constants across the Glycosidic bond vs. Glycosidic Torsion Angle, E. Fadrná: Computer modeling and simulations of nucleic acids at NCBR, Z. Kříž: Computer modeling and simulations of peptides and proteins at NCBR, M. I. Otyepka: Proteins and their interactions with small molecules studied by computer simulations, V. Sychrovský: Determination of structure, energy, and spectroscopic parameters by means of quantum chemistry, J. Vondrášek:



Calculation of interaction energy of inhibitor - enzyme complexes and studies of HIV-1 protease structure and flexibility as a function of its mutations, R. Kužel a J. Hašek: The role of the Czech and Slovak Crystallographic Association in Structural Biology, J. Vévodová: Applications of methods of protein crystallography at NCBR, J. Damborský: Protein Engineering of Dehalogenating Enzymes, J. Hašek: Structural studies of enzymatic reactions, B. Brzobohatý: Laboratory of molecular physiology at Masaryk University, Brno, J. Marek: Laboratory of numerical protein crystallography, teaching bio-crystallography for Brno and beyond, V. Bouda: Live cell as a colloidal system. Muscle contraction, V. Baumruk: Use of vibrational spectroscopy for study of biomolecules, K. Bezouška: Chemistry and mass spectroscopy applied to resolution of the complete covalent structure of small proteins, D. Štys, L. Nedbal: Structural studies at the South Bohemian University.

WWW stránka -

<http://www.jh-inst.cas.cz/~setkani/>

Počet účastníků: 90

Organizace: B. Schneider, I. Kutá Smatanová, D. Štys, J. Hašek

Viz též příspěvek v tomto čísle - zprávy

Vědecká rada Krystalografické společnosti

RNDr. Antonín Buchal, CSc.

Odbor strukturní a fázové analýzy,
Ústav materiálového inženýrství VUT Brno

RNDr. Ivana Císařová, Csc.

Katedra anorganické chemie,
Přírodovědecká fakulta UK, Praha

Prof. RNDr. Jaroslav Fiala, Csc.

Fakulta strojní, Západočeská univerzita, Plzeň

Doc. Ing. Nikolaj Ganev, CSc.

Fakulta jaderná a inženýrská ČVUT, Praha

RNDr. Jindřich Hašek, DrSc.

Ústav makromolekulární chemie AVČR, Praha

Doc. RNDr. Václav Holý, CSc.

Katedra fyziky pevné fáze,
Přírodovědecká fakulta Masarykovy university, Brno

RNDr. Jiří Hybler

Fyzikální ústav AVČR, Praha

Ing. Matej Jergel, CSc

Fyzikálny ústav SAV, Bratislava

Doc. RNDr. Radomír Kužel, CSc.

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy,
Praha

RNDr. Václav Petříček, CSc.

Fyzikální ústav AVČR, Praha

RNDr. David Rafaja, CSc.

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy,
Praha

RNDr. Lubomír Smrček, CSc.

Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava

RNDr. Pavol Šutta, Csc.

Katedra fyziky, Vojenská akadémia,
Liptovský Mikuláš

Prof. RNDr. Zdeněk Weiss, DrSc.

Centrální analytická laboratoř,
VŠB - Technická univerzita Ostrava

Redakce společnosti

Časopis společnosti

(původně Bulletin Krystalografické společnosti)

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

Krystalografická společnost se snaží o intenzivní využití Internetu. Byla zaregistrována doména xray.cz

Adresa WWW serveru: <http://www.xray.cz>

Vyzýváme všechny členy a ostatní zájemce, aby přispěli k zlepšení formy i obsahu. Přínejmenším tím, že nám oznámí odkazy na vlastní WWW stránky.

Pracovní skupina Struktura a vlastnosti

zajišťuje 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. Projekt řídí J. Ondráček (ÚMG AVČR, Praha).

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.



Grantové projekty

Společnost vítá všechny iniciativy a projekty prospěšné pro rozvoj krystalografie a oborů s ní souvisejících.

Příjmy společnosti

jsou tvořeny členskými příspěvky, příspěvky kolektivních členů, grantem GA ČR, granty od AV ČR, konferenčními poplatky a další samostatnou činností. Rozpočtové zdroje příjmu, grant na strukturní databáze (J. Ondráček) a grant na vybavení knihovny společnosti (J. Hašek) a redakce časopisu *Materials Structure* (R. Kužel) byly vynaloženy v průběhu roku 2002 v souladu s příslušnými projekty.

Spolupráce

Společnost úzce spolupracuje s následujícími odbornými organizacemi :

Odborná skupina pre fyziku a chémiu tuhých látok, Bratislava

Regionální komitét IUCr,

OS Synchrotronové záření FVS JČSMF,

a mezinárodními organizacemi IUCr, ECA, ACA, Protein Society, EPDIC committee, ICDD

Členství v Krystalografické společnosti

Podmínky členství:

Registrace a zaplacený členský poplatek, který činí 200 Kč, resp. 200 Sk ročně, pro studenty a důchodce pak 50,- Kč ročně.

Poplatek zahrnuje vložné na Rozhovory (5 jednodenních seminářů o strukturní analýze), zaslání informačních materiálů a zaslání dvou časopisů - "Newsletter IUCr" a "Materials Structure in Chemistry, Biology, Physics and Technology" několikrát ročně.

V současnosti je možné vyplnit základní data i přes Internet. Zájemci o aktivity Krystalografické společnosti, kteří si však nepřejí platit jakýkoli poplatek a být členy se mohou pouze zaregistrovat. Dostávají pak informace o akcích, ale nikoli tištěné materiály.

Práva a výhody členů Společnosti:

možnost volit, být volen a účastnit se rozhodování o činnosti Společnosti a Regionálního komitétu IUCr

možnost zúčastnit se konkurzu na poskytnutí stipendia na konferenci Společnosti a některé další akce na nichž se Společnost podílí. Stipendium může udělit buď organizační výbor příslušné akce, nebo může účast na akci dotovat výbor Společnosti. Zpravidla se poskytují slevy vložného

možnost podat vlastní výzkumný projekt grantové agentuře prostřednictvím Krystalografické společnosti

možnost využívat služeb knihovny Krystalografické společnosti

lepší dostupnost informací týkajících se krystalografie, materiálového výzkumu, strukturní analýzy, atd.

navrhnout zřízení a účastnit se aktivit specializovaných odborných skupin,

organizovat za pomoci Společnosti seminář či konferenci specializovanou na Vámi vybrané téma,

sdužovat prostředky k zakoupení či pronájmu společně sdílených prostředků (např. pronájem databází),

organizovat prostřednictvím Společnosti mnohostrannou spolupráci s právními subjekty v ČR, SR, případně v zahraničí,

podávat návrhy na udělení cen v oblasti Krystalografie

podávat prostřednictvím Společnosti návrhy na kandidáty do komisí IUCr, do ECA a ostatních mezinárodních organizací spolupracujících se Společností

Poděkování za práci pro Krystalografickou společnost

Předseda Krystalografické společnosti děkuje všem, kteří se zasloužili o dobrý průběh akcí Krystalografické společnosti v roce 2002. Zvláštní poděkování patří:

L. Dobiášové, J. Fábrymu, J. Fialovi, V. Kavečanskému, M. Komanovi, J. Kuldovi, I. Kuté Smatanové, L. Čaplovičovi, J. Markovi, R. Kuželovi, Z. Weissovi

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. 2296 809 390, Fax: 2296 809 410
E-mail: hasek@imc.cas.cz

Místopředseda:

Doc. RNDr. Pavol Šutta, Csc.
Katedra fyziky, Vojenská akadémia
Liptovský Mikuláš
E-mail: sutta@valm.sk

Místopředseda:

Prof. RNDr. Jaroslav Fiala, Csc.
KMM, ZČU, Univerzitní 22, 306 14 Plzeň
Tel: 37 763 8300
E-mail: fiala@ntc.zcu.cz, fialaj@kmm.zcu.cz

Tajemník

Doc. RNDr. Radomír Kužel, Csc.
Matematicko-fyzikální fakulta UK,
Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2
Tel.: 221911394, Fax: 224911061
E-mail: kuzel@karlov.mff.cuni.cz

J. Hašek, R. Kužel