



Regionální komitét IUCr 2001-2004

RNDr. Zbyněk Šourek, CSc. (předseda)
Fyzikální ústav AV ČR, Praha

Prof. Ing. Marian Koman, DrSc. (místopředseda)
Katedra anorganické chemie, STU Bratislava

Ing. Lubomír Čaplovič, PhD.
Materiálově technická fakulta, STU Trnava

Doc. RNDr. Juraj Černák, CSc.
Přírodovědecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika,
Košice

RNDr. Jaromír Hrdý, DrSc.
Fyzikální ústav AV ČR, Praha

RNDr. Jaromír Marek, PhD.
Laboratoř funkční genomiky a proteomiky
Přírod. fakulta Masarykovy university, Brno

RNDr. Pavol Šutta, CSc.
Katedra fyziky, Vojenská akadémia
Liptovský Mikuláš

Doc. RNDr. Zdeněk Trávníček, PhD
Katedra anorganické a fyzikální chemie,
Přírodovědecká fakulta UP, Olomouc

V srpnu se v Ženevě uskutečnil XIX. kongres a valné shromáždění IUCr, které se koná v tříletých intervalech. Valného shromáždění se s finanční podporou Rady pro zahraniční styky AV ČR zúčastnil jako delegát i zástupce Regionálního komitétu českých a slovenských krystalografů. Na tomto shromáždění byly doplněny komise. Zastoupení Čechů a Slováků v nich je stále žalostné. Náš Regionální komitét byl zařazen do II. kategorie, čímž mu přísluší dva hlasy při rozhodování Valného shromáždění, a byl zvolen nový výkonný výbor IUCr (viz např. <http://www.iucr.ac.uk/>). Tento výbor v průběhu svého funkčního období bude mj. posuzovat návrhy na místo konání XXII. kongresu v roce 2011, o jehož organizaci se případně chceme ucházet. Kongres měl tradičně vysokou odbornou úroveň, mezi více než 2000 účastníky bylo asi 20 kolegů z ČR, vesměs členů naší Kryštalografické společnosti, a bohužel jen dva kolegové ze Slovenska.

Z. Šourek

Zprávy

Výuka kryštalografie

Odborná skupina chemie a fyziky tuhých látek zorganizovala seminár pod názvom „Stav a perspektívy výučby kryštalografie na vysokých školách“. Seminár sa uskutočnil v rámci „Rozhovorov o aktuálnych otázkach röntgenovej a neutrónovej difrakcie“ pod poradovým číslom 254, dňa 6. 2. 2002 na Fakulte chemickej a potravinárskej technológie na Katedre anorganickej chemie.

Už dlhšie obdobie boli na rôznych podujatiach organizovaných Kryštalografickou spoločnosťou (KS) a Odbor-

nou skupinou chemie a fyziky tuhých látok (OS CHFTL) prezentované názory kryštalografickej komunity o nedostatočnej výučbe kryštalografie na vysokých školách. Z tohto dôvodu sa OS CHFTL podujala zorganizovať v rámci tradičných „Rozhovorov“ seminár na túto tému.

O vystúpenie na seminári bolo požiadanych 26 pracovníkov zo Slovenskej i Českej republiky, ktorí prichádzajú vo väčšej či menšej miere do kontaktu s výučbou kryštalografie. Na seminári sa zúčastnilo 42 účastníkov a v prvej časti odznelo 15 príspevkov. Seminár otvoril Prof. RNDr. Milan Melník, DrSc., vedúci Katedry anorganickej chemie FCHPT. Seminár viedol RNDr. Lubomír Smrček, CSc., pracovník Ústavu anorganickej chemie SAV. S príspevkami o výučbe kryštalografie na jednotlivých fakultách vystúpili:

Doc. Ing. Drahoš Barančok, CSc. - Katedra fyziky FEI STU, Bratislava

RNDr. Antonín Buchal, CSc. - Fakulta strojnínho inžinierstva, Brno

Ing. Lubomír Čaplovič, CSc. - Katedra materiálového inžinierstva, MTF STU Trnava

Doc. RNDr. Juraj Černák, CSc. - Katedra anorganickej chemie, PF UPJŠ, Košice

Doc. RNDr. Pavol Fejdi, CSc. - Prír.F. UK v Bratislave, študijný odbor geológia

Prof. Ing. Jaroslav Fiala, DrSc. - Západočeská univerzita, Plzeň

Ing. Nikolaj Ganev, CSc. - FJFI UK, Praha

Doc. RNDr. Jiří Kameníček, CSc. - PĚF UP, Olomouc

RNDr. Viktor Kavečanský, DrSc. - Ústav experimentálnej fyziky SAV, Košice

Doc. Ing. Marian Koman, DrSc. - Katedra anorg. Chemie FCHPT STU, Bratislava

RNDr. Radek Kužel, CSc. - MFF UK, Praha

RNDr. Jaromír Marek, CSc. - LF GP, Přírodovědecká fakulta MU, Brno

Doc. Ing. František Pavelčík, DrSc. - Prír.F UK, Bratislava

Ing. Slavomír Ďurovič, CSc. - Ústav anorganickej chemie SAV, Bratislava

Spoločným znakom všetkých vystúpení bolo konštatovanie, že výučba kryštalografie sa dostala na okraj záujmu, v žiadnom študijnom programe fakúlt sa nenachádza ako samostatný predmet, napriek tomu, že kryštalografia vytvára základný pohľad na štruktúru tuhých látok a poskytuje nevyhnutné teoretické podklady pre metódy jej charakterizácie a pre správnu interpretáciu súvislostí medzi štruktúrou a vlastnosťami látok. V niektorých predmetoch sa vyskytuje len čiastočne, využíva sa len obmedzený výsek pre potreby prednášaného predmetu, napriek tomu, že tieto vedomosti by mali patriť medzi základnú výbavu študenta. Mali by slúžiť študentom nielen ako metóda myslenia, ale aj aplikácie v oblasti štruktúry tuhých látok.



V diskusi vystúpilo 6 účastníkov seminára. Diskusné príspevky upozorňovali na potrebu propagácie kryštalografie aj na stredných školách a na potrebu prenikania kryštalografie do priemyselnej praxe. Bol vyslovený návrh, aby všetky dostupné sylaby a používaná literatúra boli zhromaždené u RNDr. R. Kužela, vedeckého tajomníka Kryštalografickej spoločnosti, kde by sa mohli využívať ako databáza.

V závere Doc. M. Koman (predseda OS CHFTL) zhodnotil priebeh seminára a za Odbornú skupinu chémie a fyziky tuhých látok ubezpečil prítomných o ochote po niekoľkých rokoch (2, 3) zorganizovať seminár s rovnakým zameraním opäť.

Výsledkom seminára bolo odporúčanie pre Regionálny komitét českých a slovenských kryštalografů na vytvorenie pracovnej skupiny na prípravu podrobných sylabov predmetu s pracovným názvom „Kryštalografia“, použiteľných po úprave na vlastné podmienky na všetkých typoch vysokých škôl.

M. Koman

1. Setkání českých a slovenských strukturálních biologů na Nových Hradech (1. SSB)

Ve dnech od 14. do 16. března 2002 se konal v prostorách Akademického a univerzitního centra na Nových Hradech první ročník Setkání českých a slovenských strukturálních biologů. Setkání se zúčastnili vědci a studenti téměř ze všech laboratoří, které se v Čechách zabývají strukturální biologii a biochemií, dále také Prof. Imrich Barak ze AV SR a profesor Flecker z Institute of Physiological Chemistry and Pathobiochemistry v Německu.

Pozvání dr. Štys přijali a úvodní slova přednesly známé osobnosti, mezi kterými nechyběli Doc. RNDr. Helena Illnerová, DrSc., předsedkyně AV ČR, RNDr. Jan Zahradník, hejtman Jihočeského kraje, Prof. RNDr. Libor Grubhoffer, CSc., prorektor JU ČB, MUDr. Nataša Návarová, místostarostka Nových Hradů a RNDr. Jiří Velemínský, DrSc., místopředseda AV ČR. V následujících dvou dnech proběhlo 6 cyklů přednášek zaměřených na strukturální biologii, NMR strukturální studie proteinů a nukleových kyselin, rentgenovou kryštalografii proteinů, kvantově-chemické studie, počítačové modelování a simulace biomakromolekul a studium biomakromolekul pomocí spektroskopických metod. Přednášky a postery, které byly v rámci 1.SSB prezentovány, byly připraveny důsledně a předneseny na vysoké odborné úrovni. V průběhu konference byly prezentovány produkty celkově pěti českých firem.

Závěrem lze konstatovat, že většina z téměř 90 účastníků byla s průběhem setkání velmi spokojena a věříme, že se zúčastní i dalšího ročníku setkání strukturálních biologů v roce 2003.

*Ivana Kutá Smatanová a Dalibor Štys
za organizační výbor 1.SSB*

Kolokvia Kryštalografické společnosti

Experimentální metody v rtg a neutronové strukturní analýze

Výpočetní metody v rtg a neutronové strukturní analýze

První z kolokvií, tak trochu jubilejní, již 30., se tentokrát uskutečnilo od 17. do 21. 6. v Beskydech, v Ostravici, v hotelu Válcovny a mělo charakter kursu. Bylo zaměřeno na přehled současného stavu experimentálních technik ve strukturní analýze, jejich užití a možnostech pro získání informací o atomové struktuře materiálů v biologii, chemii, fyzice i mineralogii. Také vzhledem k tomu se ho účastnili v hojně míře, přes 30, studenti magisterského a doktorandského studia. Jejich účast byla výrazně sponzorována a na závěr obdrželi certifikát o absolvování kursu.

Přednášky a hlavní témata jsou vypsány v předchozí celkové zprávě. Velká většina přednášek měla velmi dobrou úroveň a byly také patřičně navštěvovány i přes velmi horké a tedy unavující počasí. Možná, že to také bylo částečně způsobeno počáteční výhružkou, že bude kontrolována prezenze, pro ty, kdo chtějí získat certifikát. Programové schema bylo víceméně tradiční se začátkem v pondělí odpoledne a závěrem v pátek v poledne. Středeční odpoledne bylo ponecháno volné, čehož někteří odvážlivci využili k výstupu na Lysou horu.

Druhé kolokvium svoji tematikou navazuje a připravuje se do Nových Hradů opět na polovinu června. Bude opět zahrnovat 5. přehlídku studentských prací z oboru kryštalografie a strukturní analýzy. Hlavní osnovu programu budou tvořit pozvané referáty doplněné krátkými příspěvky a posterovou sekcí. Nezanedbatelnou součástí bude prezentace software, vzhledem ke špičkovému vybavení (učebna, rychlé připojení na Internet). V dalším programu je plánována prezentace firem, porady zájmových skupin - zprávy o činnosti, plány, financování a samozřejmě shromáždění členů Kryštalografické společnosti a výlety do okolí. Na kolokviu budou dokončeny volby nové vědecké rady společnosti.

Hlavními navrženými tématy jsou:

Řešení struktur z monokrystalů, fázový problém, řešení struktur z prášku, možnosti studia reálné struktury látek - analýza profilů difrakčních lini, zobrazování struktur, modelování struktur, optimalizační metody, dekonvoluční metody, kvalitativní fázová analýza, search-match, indexace práškového difraktogramu, popis textury, strukturní databáze

Plné texty z prvního kolokvia jsou v současné době stále shromažďovány a měly by vyjít v knize spolu s texty z chystaného kolokvia.

R. Kužel