



KRYSTALOGRAFICKÁ SPOLEČNOST

Stručný přehled činnosti v roce 2005

V roce 2005 byla Krystalografická společnost pořadatelem či spolupořadatelem celkem čtyř tradičních Rozhovorů, kolokvia Struktura 2005, 4. Setkání strukturálních biologů, regionální konferenci o práškové difrakci.

Rozhovory, konference

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

264. ROZHOVORY

Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha, 20. 1. 2005

Využití moderních víceúčelových difraktometrů, Systém firmy Panalytical

Přednášky:

R. Kužel: Difraktometr X'Pert PRO MRD, V. Holý: Zrcadlová a difuzní reflektivita na tenkých vrstvách, S. Daniš: Geometrie s vysokým rozlišením - studium epitaxních vrstev, rocking curve mapy monokrystalů, M. Dopita, D. Šimek: Studium napětí a textur tenkých vrstev, mapy recipročního prostoru měřené na Eulerově kolébce, R. Kužel, Z. Matěj, L. Nichtová: Geometrie paralelního svazku s nízkým rozlišením - studium vrstev TiO₂ a nanočástic Au, V. Goliáš: Zkušenosti s provozem difraktometru X'Pert při analýze geologických materiálů, P. Bezdička: Krystalizace chalkogenidových skel - co můžeme vidět pomocí rtg práškové mikrodifrakce, T. Grygar: HTXRD jako nástroj k identifikaci expandabilních jílových minerálů ve složitých směsích, H. Petříčková: Možnosti využití difraktometru X'Pert PRO MPD ve farmacii, R. Kužel: Použití zobrazovacích fólií a skenovacího systému VistaScan určeného pro zubní lékaře v rtg difrakci pro plošnou detekci záření,

Exkurze v laboratořích MFF UK a PřF UK.

Organizace: R. Kužel, V. Holý

265. ROZHOVORY

Akademie věd, Praha, 20. 4. 2005

Structural Biology and Pharmacy

with the President of the International Union of Crystallography

Přednášky:

W. L. Duax: Crystallography and the Noble Prize, J. Dohnálek: Enzymes - Structure and Function, J. Brynda:

X-ray Crystallography in the Czech Structural Biology, I. Kutá Smatanová: Crystallization of Membrane Proteins from Higher Plants, W. L. Duax: Antisense ORFs, Codon Bias and the evolution of the Genetic Code, H. Petříčková: Applied Crystallography in Pharmacy, J. Hašek: Structure Analysis of Polymers used in Pharmacology

Organizace: J. Hašek

266. ROZHOVORY

Ústav anorganické chemie AV ČR, Praha, 25. 10. 2005

Krystalografie v Řeži u Prahy

Přednášky:

P. Bezdička: Zkušenosti s dvouletým provozem 100 ?m mikrodifrakce, T. Grygar: Použití HT XRD k analýze jílových minerálů a hydrotalcitů, M. Klementová: HRTEM - nová metoda v ÚACH AV ČR, příklady použití, P. Lukáš: In-situ neutronová difrakční studia deformačních a transformačních charakteristik kovů, J. Šaroun: Studium mikroporosity keramik pomocí malouhlového rozptylu neutronů, J. Vacík: Neutronové hloubkové profilování a jeho aplikace, S. Vratislav: Neutronografický výzkum strukturálních parametrů zeolitů a perovskitů

Exkurze po pracovištích v Řeži (prášková difrakce, elektronová mikroskopie, reaktor).

Organizace: P. Bezdička, P. Lukáš

267. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha, 16. 12. 2005

Přednášky:

V. Janovec: Krystalografie doménových struktur, L. Sodomka: Krystalinita vláken, J. Fiala: Struktura vysoko-
legovaných chromniklových ocelí, M. Rieder: Arsen v
kyzech železa z hnědého uhlí ze severočeške hnědouhelné
pánve, L. Beneš: Využití práškové difrakce při studiu
interkalátů, L. Smrček: Dynamický disorder v struktuře
zeolitu deka-dodekasil 3R, J. Kuběna: O světle a rtg záření,
M. Polcarová: In situ rtg topografie bikystalů Fe-Si s
využitím synchrotronového záření, L. Čaplovič: Aplikácia
difrakčných technik v materiálovom inžinierstve, P. Šutta:
Transparentné vodivé a nevodivé oxidy z pohľadu rtg
difrakcie, M. Jergel: Vybrané ukážky aplikácie spekulárnej
a nespekulárnej rtg reflektometrie, R. Kužel: Studium
tenkých vrstev TiO₂ pomocí rtg difrakce a reflektivity,
J. Ondráček: HipHop upřesňování struktur proteinů,
J. Hašek: Struktura makromolekulárních systémů

Rozhovory byly částečně věnovány významným kulatý životním jubileím přednášejících.

Organizace: J. Hašek, R. Kužel



Kolokvium - Struktura 2005

Zámecký hotel Třeš , Akademické a univerzitní centrum,
20. - 23. 6. 2005

Tradiční kolokvium s 6. přehlídkou studentských prací z oboru krystalografie a strukturní analýzy.

Hlavní témata: Řešení struktur, nedifrakční metody, tenké vrstvy, materiály, textury, napětí, prášková difrakce.

Hlavní přednášející:

L. Palatinus (Fyzikální ústav AV ČR, Praha): Řešení struktur metodou převrácení náboje, S. Ďurovič (Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava), J. Hybler (Fyzikální ústav AV ČR, Praha): Spresňovanie čiastočne neusporiadaných OD štruktúr, V. Petříček (Fyzikální ústav AV ČR, Praha): Dvojčata a vícefázové monokrystalické systémy,

M. Karlík (FJFI ČVUT Praha): Iontová mikroskopie a tomografická atomová sonda (FIM-TAP), P. Haušild (FJFI ČVUT Praha): Aplikace difrakce elektronů v řádkovací elektronové mikroskopii (EBS), V. Baumruk (MFF UK, Praha): IČ a Ramanova spektroskopie - co nám mohou vibrace říci o (bio)molekulách, J. Brus (Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha): Studium struktury materiálů pomocí moderních NMR metod, J. Kulda (ILL Grenoble, Francie): Nepružný rozptyl neutronů, M. Kopecký (Fyzikální ústav AV ČR Praha): Nejnovější pokroky v rtg holografii, R. Kužel (MFF UK Praha): Difrakční zobrazení jedné částice, M. Hušák (VŠCHT Praha): Zobrazování strukturních dat metodami 3D stereoskopické vizualizace, J. Fiala (Západočeská univerzita v Plzni): Strukturní analýza měřením difuze, J. Čížek (MFF UK, Praha): Studium interkace vodíku s defekty v pevných látkách pomocí anihilace pozitronů, M. Šlouf (Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha): SAXS a QELS studium koloidních roztoků zlatých a polyethylenových částic, M. Kotrlý (Kriminalistický ústav, Praha): Strukturní analýza v kriminalistické praxi - zajímavé případy

WWW stránky <http://www.xray.cz/xray/csca/kol2005/>

Počet účastníků: 72

Organizace: R. Kužel, J. Hašek, Z. Šourek

Všechny abstrakty jsou publikovány v Materials Structure v. 12, number 2 (<http://www.xray.cz/ms/>).

6. přehlídka studentských prací z oboru rtg a neutronové strukturní analýzy

Součástí kolokvia Struktura 2005 byla též tradiční přehlídka studentských prací z oboru rtg a neutronové strukturní analýzy. Zúčastnilo se jí 21 studentů, kteří prezentovali výsledky diplomových a doktorských prací v oboru rtg strukturní analýzy z českých a slovenských pracovišť. Celkem 21 příspěvků z oblasti - zbytková napětí, tenké vrstvy, řešení struktur, fázová analýza, mikrodifrakce, proteinová krystalografie, mineralogie

Tři nejlepší práce (prezentace) byly odměněny diplomem a finanční odměnou - *Mariana Klementová* (Ústav

anorganické chemie AV ČR, Řež u Prahy): Tantaloniobaty v kasiteritu: inkluze nebo odmišleniny?, *Jan Krčmář* (Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně) Rtg difrakce na tenkých polykrystalických vrstvách, *Martina Pokorná* (Přírodovědecká fakulta, MU Brno) Crystal structure of CV-IIL lectin from human opportunistic pathogen

4. Setkání strukturních biologů

Ústav fyzikální biologie, Nové Hradky, 10. - 12. 3., 2005

Přednášky:

R. Kužel: Possibilities of modern X-ray scattering and imaging techniques in biology, T. Obšil: Regulation of 14-3-3 protein function, V. Baumruk: Solution structure and dynamics of peptides and proteins from Raman optical activity, M. Hušák: Possible use of 3D stereoscopic visualization in structural biology, I. Barák: Where the asymmetry in gene expression starts? V. Sklenář: Quo vadis? The role of NMR in structural biology

Krátké příspěvky:

J. Dohnálek, T. Skálová, V. Kopecký, L. Urbaníková, V. Suchá, J. Wolfová, J. Hašek, M. Prokop, P. Máder, L. Luley, J. Burda, P. Flecker, B. Schneider, R. Fiala, V. Sychrovský

Došlé abstrakty přednášek a posterů

WWW stránka -

<http://www.xray.cz/setkani/>

Počet účastníků: 73

Počet vývěsek: 32

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

Příspěvky v Materials Structure vol. 12 (2005), č. 1.

6th Autumn School on X-ray scattering from surfaces and thin layers

Smolenice, Slovakia, 18. 9. - 21. 9. 2005

Podzimní škola zaměřená na difrakci s vysokým rozlišením a rozptyl na površích a tenkých vrstvách.

Tutorials:

P. Zaumseil: High-resolution diffraction, P. Mikulík: X-ray Reflectometry and diffuse scattering, V. Holý: Simulation of X-ray reflectivity and diffraction curves, N. Darowski: Grazing-incidence diffraction and GISAXS, K. Walter: Texture analysis and residual strains

31 krátkých příspěvků.

WWW stránka -

<http://cmd.karlov.mff.cuni.cz/Smolenice-2005/>

Organizace: V. Holý, U. Pietsch, D. Korytář



14. Regionální konference o práškové difrakci

Liptovský Mikuláš, 21. - 23. 9., 2005

Přednášky:

M. Čerňanský: Momentové metody jedné linie, L. Smrček: Neutronová time-of-flight prášková difrakce - malý úvod, L. Čaplovič: Analýza zmeny fázového zloženia pri ohreve rýchlo stuhnutého prášku z rýchlo reznej ocele difrakciou neutronov, V. Kavečanský: Štúdium štruktúry silne neusporiadaných systémov, J. Fiala: Využití Fourierovy transformace ve spektroskopii a kvantitativní mikroskopii, M. Kolega: Fourierova analýza azimutálního profilu difrakčních linií, M. Jergel: X-ray analysis of ultra short period multilayers, R. Kužel: Studium nehomogenity a teplotní stability struktury submikrokrytalických materiálů, A. Buchal: Stanovení průměrné velikosti částic pod 5 nm rtg. difrakcí, V. Jorík: Kryštalová štruktúra [Cu(3-pyacr)2(H2O)2] komplexu z prášku, niektoré skúsenosti z riešenia problémov súvisiacich s povahou komplexných zlúčenín, F. Laufek: Krystalochemie systému Sb-Te-Ni, J. Marek: Textury tenkých vrstev, M. Černík: Röntgenová tenzometrická analýza zvyškových napätí vo valcovaných oceľových plechoch, M. Krupka: Prezentácia difraktometra X-STRESS 3000 - PANalytical, K. Kolařík: Difrakční štúdium integrity povrchu vysokopevnostní slitiny Incinel 718 po elektroerozivním obrábění a frézování, J. Drahoukoupil: Studium povrchově opracovaných oceľových vzorků, Z. Pala: Rtg. difrakční analýza makroskopické zbytkové napjatosti broušených povrchů ocelí, N. Ganey: Difrakční analýza napě ových stavů vyvolaných povrchovým opracováním železných materiálů

Počet účastníků: 22

WWW stránka -
<http://www.saske.sk/RPDK/>

Organizace: V. Kavečanský, S. Jurečka, L. Čaplovič, R. Kužel

Eighth Heart of Europe Bio-Crystallography Meeting

Karlovy Vary, 29. 9. - 1. 10. 2005

Hlavní přednáška:

Zbigniew Dauter (Argon, IL): Phasing on anomalous scattering: Multi- versus Single-wavelength,

32 krátkých příspěvků

WWW stránka -
<http://www.img.cas.cz/hec/>

Abstrakty publikovány v *Materials Structure*, vol. 12, číslo 3, 2005.

Organizace: J. Sedláček

Redakce společnosti

Časopis 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*. *Kontakt:* skalova@imc.cas.cz.

INTERNET

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

Databáze

Společnost zajišťuje nákup a distribuci databáze CSD (Crystal Structure database).

Kontakt: hasek@imc.cas.cz

Členství v Krystalografické společnosti

Podmínky členství:

Registrace a zaplacený členský poplatek, který činí 250 Kč ročně, pro studenty a důchodce pak 70,- Kč ročně.

Poplatek zahrnuje vložné na Rozhovory (5 jednodenních seminářů o strukturní analýze), zasílání informačních materiálů a zasílání 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.

Poděkování za práci pro Krystalografickou společnost

Předseda Krystalografické společnosti děkuje všem, kteří se zasloužili o dobrý průběh akcí Krystalografické společnosti v roce 2005. Zvláštní poděkování patří:

P. Bezdičkovi, V. Holému, V. Kavečanskému, S. Jurečkovi, I. Kuté Smatanové, R. Kuželovi, P. Lukášovi, J. Sedláčkovi, B. Schneiderovi, Z. Šourkovi, A. Župčanové

English version of the report will be published in next issue.

R. Kužel, J. Hašek