



PROGRAM

Pondělí, 18. 6.

11:30 - 13:00 Registrace

13:00 Zahájení

Strukturní databáze *I. Císařová, J. Brynda*

13.15

L1 p. 89

Radomír Kužel

Strukturní databáze anorganických struktur ICSD, CRYSTMET, PDF4, Pearson's Crystal Data a další volně dostupné strukturně zaměřené databáze na Internetu

14.00

L2 p. 97

Jindřich Hašek

Databáze organických struktur CSD a softwarové vybavení

14.45 Přestávka

15:10

L3 p. 101

Bohdan Schneider

Biostrukturní databáze PDB a NDB

15:40

L4

František Pavelčík p. 102

Automatické budování modelů proteinů a nukleových kyselin

16.10 Přestávka

Hlavní sál A

Studentská přehlídka I *V. Goliáš, J. Maixner*

16.30

S1 p. 127

Jan Rohlíček

Fox Grid - software pro urychlení řešení struktur z prášků metodou paralelního zpracování

16:50

S2 p. 127

Zdeněk Matěj

Rozšíření programu FOX pro analýzu mikrostruktury

17:10

S3 p. 127

Silvie Švarcová

Malířské pigmenty na bázi mědi, jejich chemismus a degradace

17:30

S4 p. 129

Ivana Jebavá

Porovnání výsledků mikrodifrakčních a makrodifrakčních experimentů na forenzních vzorcích

17.50

S5 p. 129

Richard Pažout

Structure determination of natural $\text{AgPbSbBi}_2\text{S}_6$ extracted from polished section

18.10

L15 p. 117

Martin Černík

Texture Analysis of rolled steel sheets by X-Ray and Electron Diffraction (EBSD)

Malý sál B

Kurs proteinové krystalografie

Měření na difraktometru, zpracování měření

B. Schneider

16:30

Jindřich Hašek

Úvodní poznámky. Organizace kurzu, instalace programů

16.40

Jiří Brynda

Principy měření proteinových struktur - difrakční experiment

17.40

Jan Dohnálek

Metody molekulárního nahrazení

Hlavní sál A

Panalytical User's meeting

M. Krupka

19.30

Martijn Fransen

New modules for Panalytical systems

Radomír Kužel

Different diffraction geometries - short introduction

Zdeněk Matěj p. 148

High-resolution setup

Experience from Almelo laboratories (position sensitive detectors, monochromators, thin film measurements)

P. Bezdička p. 150

Micro-diffraction with a mono-capillary: how to setup our experiment)

Radomír Kužel p. 151

Texture and stress measurement with the Eulerian cradle on MRD system, double-mirror setup

Malý sál B

Kurs proteinové krystalografie

Příprava počítačů pro kurs proteinové krystalografie

Instalace software na Linuxových počítačích



Úterý, 19. 6.

Hlavní sál A

7:00 Snídaně

Fázové transformace *J. Hybler*
8.30

L6 p. 118
Vladimír Šíma

Fázové transformace, fázové diagramy, diferenciální
 skenovací kalorimetrie

9.20
 L7 p. 118
Václav Janovec

Databáze materiálů s fázovými transformacemi

9.45 Přestávka

Hlavní sál A

**Difrakce za nestandardních podmínek, prášková
 difrakce, komerční prezentace**

J. Hybler, R. Kužel

10.15
 L8 p. 119
Hana Petříčková

Měření s vlhkostní komorou

10:40
 L9 p. 119
Roman Skála

Rozšíření programu FOX pro analýzu mikrostruktury

11:05
 L10 p. 120
Martin Kusý

Štruktúrna analýza s využitím programu MAUD

11.30
Burkhard Hoffmann
 EFG GmbH, Rigaku commercial presentation

12.00
Boris Mič
 Scientific Instruments, Brno, Komerční prezentace Bruker

Malý sál B

**Kurs proteinové krystalografie
 Krystalizace, řešení struktur**

F. Pavelčík

10:15
Ivana Kutá Smatanová p. 154

Přehled metod krystalizace proteinů

11.20
Jaromír Marek
 Metody rafinace strukturních parametrů (parametrizace,
 typy omezujících podmínek, příklady REFMAC,
 SHELXL, CNS, ARP/wARP, atd.)

12. 30 Oběd

Studentská přehlídka II *B. Schneider, J. Hašek*
13.30

S6 p. 130
Petr Kolenko

Glycosylation of IgG-Fc
13:50

S7 p. 131
Klára Šašková

The Influence of I47A Mutation on Reduced Susceptibility
 to the Protease Inhibitor Lopinavir

14:10
 S8 p. 131
Julie Wolfová

Strukturní studie flavoproteinů WrbA, zástupce nové
 proteinové rodiny

14:30
 S9 p. 132
Tatyana Prudnikova

Structural and functional studies of higher plants
 photosystem II

14.50
 S10 p. 133
Alena Stsiapanava

Crystallization study of three mutant haloalkane
 dehalogenases derived from dehalogenase DhaA of
Rhodococcus rhodochrous NCIMB 13064

15.10 Přestávka

Studentská přehlídka III *L. Čaplovič, M. Čerňanský*
15.30

S11 p. 134
Jan Drahoukoupil

Real structure depth profile of shot-peened surface of a cor-
 rosion-resistant steel

15:50
 S12 p. 135
Zdeněk Pala

X-ray diffraction study of distribution of macroscopic re-
 sidual stresses in surface layers of steels after grinding

16:10
 S13 p. 135
Andrey Chichev

New neutron powder diffractometer in NPI Řež

16:30
 S14 p. 136
Vadim Davydov

In situ neutron diffraction studies of the microstructure re-
 sponse of the plain ferritic steel on tensile straining

16.50 Přestávka

*M. Čerňanský, Z. Šourek***Hlavní sál A****17.10**

S15

p. 137

Viktoria Cherkaska

Severe plastic deformation of metals - microstructural studies

17:30

S16

p. 138

Romana Cízlová

X-ray Diffraction Analysis of Heat-Affected Particles of Tool Steel Ch3F12 Powder

17:50

S17

p. 139

Václav Valeš

Difuzní rtg rozptyl na defektech v monokrystalickém křemíku měřený za vyšších teplot

Tenké vrstvy*P. Mikulík, Z. Šourek***10.15**

L13

p. 67

David Rafaja

Microstructure analysis of nanocrystalline materials and nanocomposites using the combination of X-ray diffraction and transmission electron microscopy

11:00

L14

p. 122

Mojmír Meduňa

Interdiffusion in SiGe alloys studied by x-rays

11:25*Dušan Novotný, Pragolab*

Studium morfologie materiálů

Malý sál B**Malý sál B****Kurs proteinové krystalografie***J. Brynda***16:00***Jan Dohnálek*

Experimentální fázování (metody anomálního rozptylu a izomorfního nahrazení)

16.50 Přestávka**17.10***Petr Kolenko*

Stavění modelu do map elektronové hustoty (ARP/wARP, XFIT, atd.)

Kurs proteinové krystalografie**Cvičení na počítačích***J. Hašek***11:00***Jiří Brynda*

Zpracování měřených dat (MOSFLM+SCALA)

11.50*Jan Dohnálek*

Metody zpracování měřených dat a řešení struktury (fázového problému)

Hlavní sál A**18.30 Večeře**

20.30 Večerní Safari (podle zájmu)

Studentská přehlídka IV*Z. Šourek, P. Mikulík***11.50**

S18

p. 139

*Lea Nichtová*Strukturní studium vrstev TiO₂**12:10**

S19

p. 141

Lukáš Horák

Study of the structure of GaMnAs thin layers

12:30

S20

p. 142

Jan Krčmář

Rentgenová difrakce na polykrystalických multivrstvách v GID geometrii

12:50

S21

p. 142

Martin Mixa

Kinetic Monte Carlo simulation of quantum-dot nucleation in PbSe/PbEuTe multi

Středa, 20. 6.

7:00 Snídaně

Povrchy a tenké vrstvy*D. Rafaja***8.30**

L11

p. 103

Radomír Kužel

Krystalografie povrchů, stručný přehled metod pro studium struktury povrchů a tenkých vrstev

9.00

L12

p. 121

Ivan Oš ádal

Povrchové mikroskopie s atomovým rozlišením

9.50 Přestávka**13.15 Oběd****14.00 Volno, možnosti výletů****19.00 Shromáždění členů a přátel Krystalografické společnosti****19.30 Večeře**

**Čtvrtek, 21. 6.**

7:00 Snidaně

*J. Hašek***8.30**

L15

p. 108

Pavel Mikula

Neutron diffraction research in NPI ASCR, v.v.i. in Řež – history and present status

9.10

L16

p. 110

Radomír Kužel

Některé komerční programy pro zobrazování struktur a simulaci difraktogramů - Diamond, Crystallographica, Crystal Maker

9.50 Přestávka**Studentská přehlídka V***P. Bezdička, F. Pavelčík***10.10**

S22

p. 143

*Pavla Roupčová*Nucleation and growth of Fe nanoparticles embedded in ZrO₂ matrix at high temperature**10.30**

S23

p. 143

*Daniela Králová*Příprava a struktura nanotrubiček TiO₂**10.50**

S24

p. 143

*František Laufek*Synthesis and structure of CoGeTe and CoSn_{1.5}Te_{1.5}**11.10**

S25

p. 145

Jan Filip

Solid-state synthesis, structure and applications of potassium ferrate(VI)

11.30

S26

p. 146

Petr Kovář

Hydrotalcit interkalovaný benzoovou kyselinou, molekulární modelování a experiment

11.50

S27

p. 147

Marek Veteška

Hydrotalcit interkalovaný pyrentetrasulfonovou kyselinou, molekulární modelování a experiment

12.15 Oběd**Hlavní sál A***P. Bezdička, R. Kužel***13.30**

L17

p. 124

Lubomír Čaplovič

Analýza vplyvu parametrov naprašovania na kvalitatívne zloženie tvrdých povlakov

13:55

L18

p. 125

Jiří Marek

Rtg fázová analýza texturovaných 2-fázových vzorků

14:20

L19

p. 125

Jiří Had

Semikvantitativní metoda pro sledování tvorby transformačních produktů geopolymerů

14:45

L20

p. 126

Marian Čerňanský

Čtvrté momenty v profilové analýze

Malý sál B**Kurs proteinové krystalografie****Výsledky strukturní analýzy, databáze***M. Hušák***13:30***Bohdan Schneider*

p. 154

Deposice proteinových struktur do PDB a příslušný software

14.30*Jindřich Hašek*

Využití výsledků rentgenové strukturní analýzy (Parametrizace proteinu, parametrizace ligandů, solvatační obálka, strukturní databáze, hodnocení chyb, statistické zpracování)

15.00

Závěrečná diskuse ke kursu proteinové krystalografie

15.20

Vyhlášení výsledků studentské soutěže a závěr kolokvia