



KRYSTALOGRAFICKÁ SPOLEČNOST

Stručný přehled činnosti v období 2008-2010

V letech 2008-2010 byla Krystalografická společnost pořadatelem či spolupořadatelem celkem jedenácti tradičních Rozhovorů, kolokvií Struktura 2008, 2009 a 2010, 7. a 8. Setkání strukturních biologů a dalších akcí.

Rozhovory, konference

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

276. ROZHOVORY

Ústav molekulární biologie SAV, Bratislava, 22. 1. 2008

Přednášky:

V. Hlinková: Ribonukleáza Sa2 - katalytický mechanismus štípenia a rozpoznávanie RNA, P. Řezáčová: Strukturní studia katabolických represorů *Bacillus subtilis*, J. Brynda: Strukturní studia quinon reduktázy z *E. coli*, N. Kostlánová: Strukturní studium proteinů vázajících sacharidy, G. Ondrovičová: Štruktúrny výskum ATP závislých proteáz P. Florek: Biochemické štúdie SpoIIISA-SpoIIISB toxín-antitoxínového systému z *Bacillus subtilis*, Vernon Smith: Fast track to a 3D protein Structure using Automated Crystal Imaging, Screening and Data Collection, I. Baráth: Môže nukleárny receptor HNF4 viaza syntetické ligandy?, J. Hašek: Projekty proteinové strukturní analýzy řešené v Ústavu makromolekulární chemie AV ČR.

Exkurze.

Organizace: L. Urbániková

277. ROZHOVORY

Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Praha, 28. 5. 2008

Nový difraktometr Bruker D8 v laboratoři Rotan a přednáškaf Prof. Hartmuta Fuesse

Přednášky:

Z. Šourek: Představení instalované verze difraktometru D8 DISCOVER SUPER SPEED SOLUTION, O. Pacherová: Zkoumání krystalografické struktury tenkých monokrystalických vrstev aparaturou D8 – DISCOVER, P. Vaněk: Příprava keramiky EuTiO_3 s využitím mechanochemické aktivace a její charakterizace, Dieter Bertelmann: Thin films and X-ray diffraction, H. Fuess: In-situ characterization of materials for piezoceramics, Li-ion batteries and fuel cells, F. Fendrych: Nanostrukturované magnetické vrstvy: příprava, charakterizace, užití. J. Kub: Měření reflektivity a teplotních závislostí mřížových parametrů

Organizace: Z. Šourek

278. ROZHOVORY

Zentiva, a.s., 26. 11. 2008

Strukturní analýza ve vývoji léčiv

Přednášky:

Sekce A. Význam krystalové struktury API pro farmaceutický průmysl

H. Brusová: Polymorfie – současné trendy ve vývoji, M. Hušák: Fázové přechody léčiv studované pomocí synchrotronového záření/ řešení struktur z prášků, J. Brus: NMR krystalografie farmaceuticky aktivních látek, N. Minks: Patentování, T. Pekárek: Nástroje pro monitoring velikosti částic v lékových formách

Sekce B. Význam struktury proteinů pro farmaceutický průmysl

J. Brynda: Rtg strukturní analýza proteinů jako nástroj pro návrh léčiv, P. Kolenko: Glycosylation modulating efficacy of antibody-based therapeutics, R. Hrabal: Role NMR spektroskopie ve strukturní biologii, P. Řezáčová: Role NMR spektroskopie ve strukturní biologii, Jindřich Hašek: Využití synchrotronového záření pro diagnostiku a vývoj nových léčiv.

Exkurze. PLF a masti plus exkurze do laboratoří PF.

Organizace: H. Brusová

279. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR v.v.i, 19. 3. 2009

Rentgenová strukturní analýza v chemii

V. Langer: Strukturní chemie v praxi, B. Kratochvíl: Farmaceutické kokrystaly, L. Smrček: O spojení kryštalografie a kvantovej chémie, E. Scholtzová: NBO analýza - užitočný nástroj pri analýze kryštalovej štruktúry látok, J. Kožíšek: Ziskavanie fyzikálno-chemických vlastností z difrakčných dát, R. Černý: Hydridy: Úspěchy i lécky práškové difrakce, J. Fábry: Závislost čtených typů prostorových grup organických a organometalických látek na redukováných objemech základních buněk, J. Hašek: Využití synchrotronového záření pro studium struktury a dynamiky makromolekul.

Organizace: J. Hašek

280. ROZHOVORY

Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava, 11. 6. 2009

k životnému jubileu Ing. Slavomila Ďuroviča, CSc.

Přednášky:

E. Makovický: Aké staré sú quazikryštalý - výlet do kultúrnej či archeologickej kryštalografie, M. Rieder: Silikátové fáze schopné väzati radioaktívnej Cs :syntéza a kryštalové struktúry, J. Hybler: OD charakter a polytypie minerálu kettneritu, CaBiOFCO_3 , J. Majling: Nové zájmové oblasti v aréne termooptických meraní, V. Petříček: Tradice řešení obtížných krystalových struktur v našich zemích, T. Havlík: O možných aplikáciách rtg difraktometrie pri recyklácii odpadov, J. Kameníček: Quo vadis, rtg strukturní analýza, D. Tunega: Aktivita katio-



nových adsorpčních míst zeolitů a smektitů - porovnání, J. Kožíšek: Elektronová struktura komplexů přechodných kovů, J. Fiala: Rtg difrakce v mecha-nochemii

Organizace: L. Smrček

281. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, 20. 7. 2009

Compact Light Source

Přednášky:

J. Dohnálek: Compact Light Source a jeho možnosti

Všeobecná diskuse zaměřená na parametry zdroje, potenciální využití a na přístup externích uživatelů

Pracovní diskuse o výzkumném programu Strukturální biologie a proteinového inženýrství projektu BIOCEV.

Organizace: J. Hašek

282. ROZHOVORY

Výzkumný Ústav Anorganické Chemie, a.s. , Ústí nad Labem, 4. 11. 2009

Přednášky:

M. Petrák: Historie rentgenového pracoviště ve VÚAnCh, a.s. , Ústí nad Labem, P. Ryšánek: Využití práškové rtg. difraktometrie k analýze a sledování likvidace azbestu, N. Ganjev: Aplikace rtg. difrakční tenzometrie ve strojírenství a materiálovém výzkumu , P. Antoš: Využití rtg. metod pro charakterizaci pigmentů a nátěrových hmot, O. Bortnovskyi: Využití práškové rtg. difrakční analýzy při vývoji geopolymerů, P. Koutník: Využití práškové rtg. difrakční analýzy při vývoji technologie výroby kalciumaluminátů

Organizace: P. Ryšánek

283. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha, 10. 12. 2009

Strukturální analýza

Přednášky:

A. Fingerland: Jak z vědy ven, J. Dubský: Využití difrakce při studiu procesu plazmatického stříkání, P. Šutta: Výzkum materiálů pro fotovoltaické technologie II. a III. generace na NTC ZČU v Plzni, J. Kameníček: Rtg difrakce na Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého – historie a současnost, R. Pažout: Chemismus a krystalové struktury vybraných přírodních sulfosolů Ag-Pb-Bi-Sb, P. Bezdička: Všední den jednoho rentgenáře

Organizace: J. Hašek, R. Kužel

284. ROZHOVORY

Fyzikální ústav AV ČR, Cukrovarnická, 18. 5. 2010

U příležitosti významného životního jubilea Prof. Milana Riedera

Přednášky:

Ivo Kraus: Laudacio, M. Klementová: Od precese k precesi, L. Palatinus: How bad is too bad?, P. Comodi, HP-HT mineral physics and the implication for geosciences, S. Nazzareni: High pressure behavior of gypsum, F. Laufek: Aplikace experimentální mineralogie na systémy obsahující Te a Se, L. Smrček: Dynamika vodíků v 1:1 a 2:1 vrstevnatom silikátě pomocí neelastického rozptylu neutronů, R. Gyepes: Monokrystalová struktura úspěšně vyřešena. Víme tedy vše?!!, J. Fábry, Poznámky ke konfiguraci aminové skupiny -NH₂, R. Skála: Experimentally shock-loaded dolomite: TEM and XRD study, M. Rieder: Strastiplné cesty k objevům, M. Dušek: O oddělení strukturální analýzy. Exkurze.

Organizace: M. Klementová, J. Hybler

285. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha, 20. 9. 2010

Prediction of Structure and Dynamics of Biomacromolecules

Přednášky a kurzy:

Samuel Coulbourn Flores: Prediction of Hinge Regions in Proteins. The Hinge Atlas, MolMovDB servers, and Molecular Motion Database.

B. Schneider, F. Pavelčík: Local Nucleic Acid Conformations from Experimental Data

Samuel Coulbourn Flores (Stanford University): Tutorial on the RNABuilder. Fundamentals and Applications.

Organizace: J. Hašek

286. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha, 13. 12. 2010

Přednášky

Josef Kuběna: Zajímavosti o křemíku, J. Fiala: Studium reálné struktury pomocí rtg difrakce, M. Černík: Textury hexagonálních kovů, rtg analýza meteoritů, R. Kužel: Analýza zbytkových napětí a textur v tenkých vrstvách, vybrané nestandardní příklady, J. Hašek: Využití Cambridgeské strukturální databáze ve vede a při výuce. Nové uživatelské prostředí v roce 2011

Organizace: J. Hašek



Kolokvium - Struktura 2008

Hotel Huberts, Valtice
16. - 19. 6. 2008

Hlavní témata: Užití synchrotronového záření, projekt CESLAB

Přednášky:

Z. Pokorná: Synchrotron - fyzikální principy a problémy, P. Mikulík: Projekt Středoevropské synchrotronové laboratoře CESLAB, J. Hrdý: Wiggler, undulátory a další zdroje synchrotronového záření, P. Oberta: Synchrotronová optika, R. Vašina: Konstrukce monochromátorů a fokusační optiky od IR po měkké rtg záření, P. Vagovič: Monochromatizace tvrdého rtg záření, V. Procházka: Nukleární rezonanční rozptyl a Mössbauerova spektroskopie s užitím synchrotronového záření, V. Holý: Studium nanostruktur synchrotronovým zářením, V. Holý, J. Dohnálek: Alternativní malé zdroje intenzivního rtg záření, J. Hašek: Difrakční měření pro biokrystalografii na zdrojích synchrotronového záření, Y. Chuskin: Application of X-ray photon correlation spectroscopy to soft matter, R. Mokso: Zobrazovací metody, J. Roithová: VUV a chemie v plynné fázi, J. Žabka: Aplikácia synchrotrónneho žiarenia pri štúdiu ionosféry planét, G. Schoenense: X-ray photoemission electron microscopy using synchrotron radiation - a powerful approach to chemical nanoanalysis, surface magnetism and ultrafast dynamics, M. Dopita, R. Kužel: Synchrotronové záření pro materiálový výzkum a práškovou difrakci, M. Vondráček: Česká Materials Science Beamline na synchrotronu ELETTRA.

Krátké přednášky:

M. Jergel: Real-time tracking of fast superparamagnetic nanoparticle self-assembling by focused synchrotron beam, P. Klang: Struktura whiskerů GaAs vyrostlých na křemíkových nanovláčkách, M. Barchuk: Monte-Carlo simulation of diffuse X-ray scattering from dislocations in epitaxial layers, B. Schneider: Konformace nukleových kyselin, A. Stsiapanava: Crystallization and preliminary X-ray characterization of DhaA mutants from *Rhodococcus rhodochrous*, A. Štěpánková: Beta-Galactosidáza z *Arthrobacter* sp. C2-2 inhibovaná galaktonolaktonem; Krystalová struktura v rozlišení 2.2 Å.

Přístroje:

J. Dohnálek: Projekty BIOCEV and INSTRUCT, J. Dohnálek: The first experience of a protein crystallographer with the Oxford Diffraction Enhanced Ultra source and the Atlas CCD detector, V. Smith: Bruker Latest Advances in Protein Crystallisation & Screening, M. Benson: Rigaku Automated crystal growth, transport, orientation and retrieval from Rigaku, V. Smith: Bruker Highest signal - Lowest noise: Detectors for X-ray crystallography, P. Munk: X-ray Diffraction analysis of packaged counterfeit drugs and controlled substances (narcotics), Peter Munk: 1 Determination of Specific Surface Area and Nanoparticle Size Distribution by SAXS

WWW pages: <http://www.xray.cz/xray/csca/kol2008/>

Počet účastníků: 95

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

Všechny abstrakty jsou publikovány v Materials Structure v. 15, number 2a (<http://www.xray.cz/ms/>).

17. Regionální konference o práškové difrakci

Valtice, 19. - 20. 6., 2008

organizovaná společně s kolokviem

Přednášky:

S. Daniš: Studium magnetických struktur, V. Petříček: Upřesňování magnetických struktur v systému Jana2006, J. Maixner: Zkušenosti s provozem podavače vzorků pro difraktometr XPert Pro, J. Drahokoupil: Měření monokrystalů na práškovém difraktometru, D. Šimek: Transformace NiTi drátů s tvarovou pamětí při deformaci sledovaná synchrotronovým zářením, P. Roupcová: Analýza fázového složení Zr-Fe-V po opakovaném nabíjení a vybíjení vodíkem, J. Hamza: Vliv reálné struktury na kvantitativní fázovou analýzu, L. Smrčok: Štruktúra K_2TaF_7 pri 720 C - kombinované využitie synchrotrónových práškových difrakčných dát a DFT výpočtu v tuhej fáze, F. Laufek: Krystalografická studia pyritových fází PtSnS, PtSeSe a PtSnTe, A. Buchal: Ocel ČSN 14 331 po 10-ti letech po zpracování, M. Čerňanský: Kumulanty v profilové analýze, Z. Pala: Studium povrchových vrstev rozměrných vzorků difraktometrem XPert Pro, Z. Matěj: Koplanární grating exit rtg difrakce na tenkých polykrystalických vrstvách, L. Nichtová: Studium krystalizace tenkých vrstev TiO_2 .

Number of participants: 21

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

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

Kolokvium - Struktura 2009

Parkhotel Hluboká, Hluboká nad Vltavou
22. - 25. 6. 2009

Hlavní témata: strukturní analýza, biokrystalografie, rtg přístrojová technika, rtg zobrazování, zdroje, povrchy, reálná struktura, chemická krystalografie

Přednášky:

P. Vojtíšek: Stereochemie komplexů lanthanoidů užívaných v medicíně: Vztahy mezi strukturou a funkcí, F. Laufek: Strukturní typy anorganických látek v databázi ICSD, P. Řezáčová: Současné problémy v proteinové krystalografii, B. Schneider: Nová skupina krystalografie proteinů na Biotechnologickém ústavu, S. Daniš: Koherentní difrakce, J. Fiala, I. Kraus: Povrchy a rozhraní, M. Dopita: Electron backscattered diffraction - principles and applications, P. Mikulík: Mapování rozorientace krystalové mříže metodou rocking curve mapping, M. Kotrlý: Mikro a nanomateriály ve forenzní oblasti, M. Šlouf: Elektronová difrakce, mikroprvková a obrazová analýza



nanokrystalů, M. Klementová: Elektronová difrakce - SAED, CBED, NBED, PED

Krátké přednášky:

J. Drahokoupil: Výpočet instrumentální funkce, M. Čerňanský: Poznámky k momentům difrakčních profilů, P. Roupčová: Influence of protective gas on the phase composition of Mg-Ni-Fe-H based nanocomposite prepared by Spark synthesis J. Kopeček: Feromagnetická slitina s tvarovou pamětí $\text{Co}_{38}\text{Ni}_{33}\text{Al}_{29}$ - příprava monokrystalů a jejich charakterizace, P. Vojtíšek: Užitečný disorder, J. Moncol: Polymorfia, izomorfia, distorzná izoméria a supramolekulová izoméria komplexů $[\text{Cu}(\text{RCOO})_2(\text{dena})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ (dena = N,N-dietylnikotinamid), J. Hašek: Struktura valinomycinu a jeho komplexů, V. Goliáš: Zkušenosti s testováním RTG mikrodifrakčních technik pro použití ve forenzní oblasti, P. Kacerovský: Mikroskopie nanočástic a vrstev s nanočásticemi, P. Klang: X-ray characterization of GaAs nanowires on Si Nanowires

Instruments

L. Pina: Diffracted-beam analyzer with multiple single crystals for high resolution parallel-beam X-ray diffraction, B. Míč: Bruker products, J. Maixner: Zkušenosti s provozem pozičně citlivého detektoru LynxEye, P. Beran: Prášková neutronová difrakce v ÚJF, T. Samtleben: New Possibilities for X-ray Diffractometry: Bringing Light into Homelabs, D. Gotz: New applications of the PIXcel detector, O.Presly: Cu vs Mo in Treatment of a Non-merohedral Twin using CrysAlisPro, S. Prugovecki: Hard radiation, Pair Distribution Functions

7. přehledka studentských prací z oboru rtg a neutronové strukturní analýzy

Součástí kolokvia Struktura 2009 byla též tradiční přehledka studentských prací z oboru rtg a neutronové strukturní analýzy. Zúčastnili se jí studenti z různých institucí v České republice a na Slovensku, kteří prezentovali výsledky diplomových a doktorských prací v oboru rtg strukturní analýzy z českých a slovenských pracovišť. Celkem 20 příspěvků z oblasti - zbytková napětí, tenké vrstvy, řešení struktur, nanokrystalické materiály, proteinová krystalografie.

Nejlepší práce (prezentace) byly odměněny diplomy a tři nejlepší i finanční odměnou - *Michael Barchuk* (Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha): Monte Carlo simulation in thin layers of GaN, *Jan Krčmář* (Přírodovědecká fakulta Masarykovy Univerzity, Brno): Rentgenová difrakce na polykrystalických multivrstvách v GID geometrii, *Andrea Štěpánková* (Ústav makromolekulární chemie AV ČR): The binding modes of ligands in the active site of α -galactosidase, *Jan Jiša* (Přírodovědecká fakulta Masarykovy Univerzity, Brno): Limity metody rtg reflexe, *Petr Kolenko* (Ústav makromolekulární chemie AV ČR): Design of novel polymers for macromolecular crystallography.

V rámci kolokvia byly uspořádány tři kursy:

Jana 2006 (V. Petříček, M. Dušek)

CCDC databáze (J. Hašek)

Reálná struktura polykrystalických materiálů (R. Kužel)

WWW stránky <http://www.xray.cz/xray/esca/kol2009/>

Počet účastníků: 79

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

Všechny abstrakty jsou publikovány v Materials Structure v. 16, number 2a (<http://www.xray.cz/ms/>).

Kolokvium - Struktura 2010

Hotel Soláň, Soláň

14. - 17. 6. 2010

Hlavní témata: prezentace laboratoří

Přednášky:

J. Marek: Výroba RTG aparatur v ČSR, Z. Šourek: Laboratoř ROTAN, E. Dobročka: Rtg laboratorium s rotačnou anódou združenia ústavov SAV MULTIDISC - možnosti difraktometra Bruker D8 DISCOVER SSS, M. Jergel: Rtg metody a nové rtg laboratorium pre koplanárne a nekoplanárne mapovanie reciprokeho priestoru na tuhých a kvapalných povrchoch na FÚ SAV, M. Meduňa: RTG strukturní metody na Ústavu fyziky kondenzovaných látek PČF MU, G. Demo: Aktualne technologické zazemie určené pre kryštalografiu biomakromolekul v Národnom centre pre výskum biomolekul, B. Schneider: Strukturní biologie na Biotechnologickém ústavu AV ČR, I. Kutá Smatanová: Proteinová krystalografie na JČU, J. Hašek: Strukturní analýza molekulárních systémů v Ústavu makromolekulární chemie AV ČR, J. Ševčík: História a súčasnosť kryštalografie bielkovín na ÚMB SAV, V. Goliáš: Rentgenová difrakce v geologických oborech na Přírodovědecké fakultě UK v Praze: Bahna a uran, L. Čaplovič: Laboratorium štruktúrnych analýz Ústavu materiálův MTF STU v Trnave, M. Černík: Röntgenová difrakcia v podmienkach U.S.Steel - zvyškové napätie, textura a fázova analýza, N. Ganev, Z. Pala: Rentgenová a neutronová difrakce na ČVUT v Praze, M. Dušek: Oddělení strukturní analýzy na Fyzikálním ústavu AV ČR, J. Hybler: Laboratoř pro orientaci krystalů FZÚ AVČR, M. Šlouf: Elektronová mikroskopie, mikroanalýza a difrakce na ÚMCH AV ČR, v.v.i., L. Palatinus: Laboratoř precesní elektronové difrakce FZÚ AVČR, J. Kulda: European infrastructures for neutron scattering studies, P. Beran: Neutronové difrakční experimenty na přístroji MEREDIT, M. Kotrlý: Rentgenové metody v kriminalisticko-technické a znalecké praxi Kriminalistického ústavu Praha, M. Koman: Influence of X-ray structure on the development of coordination chemistry, J. Kožíšek: Elektronová struktura koordinačních zlúčenin, I. Císařová: Centrum molekulových a krystalových struktur na Přírodovědecké fakultě v Praze, J. Rohlíček: RTG strukturní analýza na ÚCHPL VŠCHT v Praze, J. Filip: RTG difrakce nanomateriálů na Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého v Olomouci, R. Kužel, S. Daniš: Studium tenkých vrstev a nanomateriálů na MFF UK, M. Pospíšil: Použití molekulárních simulací při řešení struktur. Vyřešené struktury vrstevnatých jílů.

Krátké přednášky:

F. Eichler: Možnosti prognózy stability sulfidů vůči zvětrávání z parametrů získaných Rietveldovou metodou, P. Roupcová: Změny fázového složení komplexních hydridů na bázi NaAlH_4 exponovaných na vzduchu, R. Skála: On the elastic behavior of zeolite paulingite: a synchrotron powder diffraction study, F. Laufek: Syntéza a struktura Pd_3AgSe a $\text{Pd}_3\text{Pb}_2\text{Te}_2$, J. Drahokoupil: Zeolitové membrány - ZSM-5, L. Urbániková: Štruktúra a funkcia xylanázy A z *Erwinia chrysanthemii*, T. Prudnikova: Structure-functional analysis of a haloalkane dehalogenase DbeA from *Bradyrhizobium elkanii* USDA94, V. Schmidt: Crystallization of higher plant photosystem II, J. Haníková: Štruktúra koordinačných zlúčenín Cu(II) S N metyl-derivátmi etanu; diaminu a tetrafluoridoboritanovým aniónom, P. Vranec: Complexes of Ni(II) and Pd(II) with 8-hydroxyquinoline derivatives, I. Kočanová: Príspevok k štúdiu kryštálových štruktúr Cu-Ni heterobimetalických koordinačných zlúčenin, M. Čerňanský: Metoda dvou záření na určení velikosti krystalitů a mikrodeformací, J. Kopeček: Strukturní vývoj ve feromagnetické slitině s tvarovou pamětí $\text{Co}_{38}\text{Ni}_{33}\text{Al}_{29}$, D. Šimek: Sledování vlastností perlitické oceli v rtg. difrakci, M. Klementová: SiGe produkty připravené pomocí CVD, P. Klang: Structural analysis of GaAs/Si nanowires, T. Čechal: Periodické modulace deformačního pole a magnetické anizotropie v (Ga,Mn)As/InAs/GaAs strukturách

Přístroje:

T. Samtleben: Clever diffractometers with the Incoatec microfocuse source, B. Míč: Bruker prezentace, S. Prugo-veckí: Panalytical 2D and 3D detector), E. Sarakinou: New techniques for TEM nano-analysis : precession diffraction and 3D diffraction tomography for structure determination and (EBSD-TEM like) high resolution phase/orientation maps, L. Pína: X-ray Detector with Submicron Resolution

V rámci kolovnia byly uspořádány kurzy:

Proteinová krystalografie
(J. Dohnálek, J. Brynda, P. Pachel, J. Hašek),
Program MAUD (M. Dopita, M. Černík),
Program MStruct (Z. Matěj)

7th Discussions in Structural Molecular Biology

Ústav fyzikální biologie, Nové Hrady, 12. - 14. 3. 2009

Hlavní přednášky:

R. Ettrich: Structure of the motor subunit and translocation model for EcoR124I restriction-modification complex, J. Dohnálek: The Small Laccase from *Streptomyces coelicolor*, Z. Jiroušková: Electronegativity Equalization Method - Fast Method For Charge Calculation, J. Kmu-níček, M. Kuba: Metacentrum: e-infrastructure for solving structural biology research challenges, J. Burda: Quantum chemical description of the properties and reaction mechanisms of selected anticancer metallodrugs with biomolecule, J. Přecechtělová: The influence of backbone and

solvent dynamics on ^{31}P chemical shift tensors in Dickerson dodecamer: A combined MD/DFT study, B. Schneider: DNA local conformations and their sequence preferences, I. Kratochvílová: Conductivity of natural and modified DNA measured by Scanning Tunneling Microscopy. The effect of sequence, charge and stacking, V. Sklenář: Quo vadis? NMR as an eminent tool for structural and systems biology, T. Obšil: Role of 14-3-3 proteins in the regulation of G-protein signaling, J. Jonák: Proteosynthetic elongation factor EF-Tu domains: thermal adaptation and functions

Krátké příspěvky:

P. Florek, J. Hašek, A. Štěpánková, T. Koudeláková, J. Vondrášek, M. Krupička, A. Fořtová, V. Štumbauer, V. Sychrovský, I. Beššeová, J. Černý, P. Pachel, F. Lankaš, R. Chaloupková, V. Bauerová, Z. Halbhuber, J. Vlach, P. Plevka, D. Štys

WWW - <http://www.structbio.eu/>

Number of participants: 109

Number of posters: 42

Příspěvky v Materials Structure vol. 16 (2009), č. 1a.

8th Discussions in Structural Molecular Biology

Ústav fyzikální biologie, Nové Hrady, 18. - 20. 3. 2010

Hlavní přednášky:

P. Jungwirth: The interface between oxidized phospholipid bilayers and aqueous solutions, R. Ettrich: Was binding of free amino acids an early innovation in the evolution of allostery? J. Koča: Computational methods as a component of modern structural biology, I. Barák: Molecular and structural mechanisms of cell division site recognition in *Bacillus subtilis*, B. Schneider: Bioinformatic analyses of the first solvation shell of nucleic acids, M. Kuba: MetaCentrum - On the Way from Distributed Computing to Cyber Infrastructure for Research, D. Štys: Three dimensional information structure of living cell fate, V. Motáčková: Structure and dynamics of RNA polymerase delta subunit from *Bacillus subtilis* determined by NMR spectroscopy, K. Kubíček: Structural insights into recruitment and dissociation of RNA polymerase II termination factors, V. Veverka: Structural insight into regulation of the Wnt/b-catenin signalling pathway by sclerostin: implications for osteoporosis treatments

Krátké příspěvky:

Z. Tošner, P. Srb, J. Prchal, V. Kopecký, V. Andruschenko, I. Kratochvílová, B. Minofar, V. Štěpánková, T. Mozga, V. Spiwok, R. Svobodová-Vařeková, J. Černý, L. Benda, C.M. Ionescu, J. Alán, T. Obšil, K. Procházková, P. Mader, D. Kopečný, J. Wolfová, T. Klumpler, J. Hašek F. Hóbor, J. Houser, R. Dvorský

WWW - <http://www.structbio.eu/>

Number of participants: 113

Number of posters: 44



Příspěvky v Materials Structure vol. 17 (2010), č. 1a.

Česká společnost pro strukturní biologii

Na 8. setkání strukturních biologů byla založena Česká společnost pro strukturní biologii, schváleny stanovy a zvolena rada společnosti. Adresa společnosti je

The Czech Society for Structural Biology
(Česká společnost pro strukturní biologii)
Videňská 1083
CZ-142 20 Praha 4, Czech Republic
fax: +420 296 443 610
IČO: 0022869433

Rada:

Ing. Jan Dohnálek, Ph.D. předseda
Prof. RNDr. Vladimír Sklenář, DrSc., místopředseda
Ing. Bohdan Schneider, DrSc., pokladník

Doc. RNDr. Rudiger Ettrich, PhD, RNDr. Jindřich Hašek, DrSc., Ing. Richard Hrabal, CSc., Doc. RNDr. Tomáš Obšil, Ph.D., členové.

Vědecká rada Krystalografické společnosti

2007-2010

- Ing. Hana Brusová
Laboratoře pevné fáze a optické čistoty
Zentiva, a.s.
- RNDr. Jiří Brynda, CSc.
Ústav molekulární genetiky
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha
- RNDr. Antonín Buchal, CSc.
Odbor strukturní a fázové analýzy,
Ústav materiálového inženýrství VUT Brno
- Ing. Eubomír Čaplovič, PhD.
Materiálovotechnická fakulta, STU Tmava
- Prof. RNDr. Jaroslav Fiala, CSc.
Západočeská univerzita, Plzeň
- Doc. Ing. Nikolaj Ganev, CSc.
Fakulta jaderná a inženýrská ČVUT, Praha
- RNDr. Jindřich Hašek, DrSc.
Ústav makromolekulární chemie
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha
- Prof. RNDr. Václav Holý, CSc.
Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha
Přírodovědecká fakulta MU, Brno
- RNDr. Jiří Hybler, CSc.
Fyzikální ústav
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha
- RNDr. Jiří Kulda, CSc.
Institute of Laue-Langevin
Grenoble, France

Mgr. Ivana Kutá Smatanová, PhD
Ústav fyzikální biologie, Jihočeská univerzita
v Českých Budějovicích

RNDr. Radomír Kužel, CSc.
Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy,
Praha

RNDr. Zbyněk Šourek, CSc.
Fyzikální ústav
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha

Volby nové vědecké rady

Na kolokviu Struktura 2010 na Soláni, dne 14. 6. byly ukončeny volby vědecké rady na další období. Hlasování probíhalo před tím i korespondenčně. Volební komise ve složení, předsedkyně Ivana Císařová, členové Petr Bezdička, Marian Koman, Edmund Dobročka porovnala hlasovací obálky se seznamem Krystalografické společnosti (všechny hlasy odpovídaly členům společnosti, nikdo nehlasoval dvakrát). Komise obdržela celkem 88 platných hlasovacích lístků, rozlepila obálky, vyjmula lístky a zlikvidovala obálky, sečetla hlasy. Předsedkyně komise pak zveřejnila pořadí prvních 13 kandidátů s počtem obdržených hlasů (v závorce).

Vědecká rada Krystalografické společnosti

2010-2013

- Ing. Hana Brusová (39)
Laboratoře pevné fáze a optické čistoty
Zentiva, a.s.
- RNDr. Jiří Brynda, CSc. (47)
Ústav molekulární genetiky
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha
- Prof. RNDr. Jaroslav Fiala, CSc. (47)
Západočeská univerzita, Plzeň
- Prof. Ing. Nikolaj Ganev, CSc. (53)
Fakulta jaderná a inženýrská ČVUT, Praha
- RNDr. Jindřich Hašek, DrSc. (68)
Ústav makromolekulární chemie
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha
- RNDr. Jaromír Hrdý, DrSc. (45)
Fyzikální ústav
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha
- RNDr. Jiří Hybler, CSc. (45)
Fyzikální ústav
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha
- RNDr. Jiří Kulda, CSc. (52)
Institute of Laue-Langevin
Grenoble, France
- Doc. Ivana Kutá Smatanová, PhD (58)
Ústav fyzikální biologie, Jihočeská univerzita
v Českých Budějovicích



Doc. RNDr. Radomír Kužel, CSc. (80)
Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy,
Praha

Doc. RNDr. Petr Mikulík, PhD (51)
Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy,
Praha

Ing. Bohdan Schneider, CSc. (36)
Biotechnologický ústav,
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Zbyněk Šourek, CSc. (61)
Fyzikální ústav
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha

Nikdo z kandidátů nezískal méně než 24 hlasů. Při odstoupení člena vědecké rady bude tato doplněna z náhradníků dle dalšího pořadí (Jiří Kameníček, Martin Kusý).

Nová vědecká rada na svém prvním zasedání zvolila funkcionáře Krystalografické společnosti.

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. Články z časopisu jsou volně dostupné ve formátu PDF na adrese: <http://www.xray.cz/ms>. Časopis je zařazen do databáze volně dostupných elektronických časopisů Directory of Open Access Journals (<http://www.doaj.org/>).

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).

INTERNET

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

Vyzýváme všechny 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

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).

Synchrotronová sekce

Synchrotronová sekce v rámci Krystalografické společnosti byla založena v červnu 2008 na kolokviu Struktura 2008. Jejím cílem je sdružit uživatele synchrotronového záření a poskytnout platformu pro výměnu informací široké komunitě využívající synchrotronové záření, která zahrnuje nejen fyziky, ale i chemiky, biology, geology, lékaře, techniky a pracovníky dalších oborů. Momentální webová stránka je umístěna na <http://www.phys-ics.muni.cz/ufkl/SynSekce>.

Grantové projekty

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

Spolupráce

Společnost úzce spolupracuje s následujícími odbornými organizacemi:

Odborná skupina pre fyziku a chémiu tuhých látok, Bratislava

Regionální komitét IUCr,

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

Členství v Krystalografické společnosti

Podmínky členství:

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

Poplatek zahrnuje vložné na Rozhovory (5 jednodenních seminářů o strukturní analýze), zasilání informačních materiálů a zasilání 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 konference 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 databázi);

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 letech 2008-2010. Zvláštní poděkování patří:

H. Brusové, J. Hyblerovi, M. Klementové, I. Kuté Smatanové, R. Kuželovi, P. Lukášovi, P. Mikulíkovi, P. Ryšánkovi, B. Schneiderovi, L. Smrčokovi, Z. Šourkovi.

Sekretariát společnosti 2007-2010

Předseda:

RNDr. Jindřich Hašek, DrSc.
Ústav makromolekulární chemie AV ČR

Místopředseda:

Ing. Lubomír Čaplovič, PhD.
Materiálovotechnická fakulta, STU Trnava

Místopředseda:

Prof. RNDr. Jaroslav Fiala, Csc.
Západočeská univerzita

Tajemník

Doc. RNDr. Radomír Kužel, Csc.
Matematicko-fyzikální fakulta UK

Sekretariát společnosti od r. 2010

Činnost společnosti řídí sekretariát společnosti ve složení:

Předseda:

RNDr. Jindřich Hašek, DrSc.
Ústav makromolekulární chemie AV ČR
Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6
Tel. 00420- 296 809 390,
Fax: 00420- 296 809 410
E-mail: hasek@imc.cas.cz

Místopředseda:

RNDr. Zbyněk Šourek, CSc.
Fyzikální ústav AV ČR
Na Slovance 2
182 21 Praha 8
Tel. 00420- 266 052 892
Fax: 00420- 286 890 527
E-mail: sourek@fzu.cz

Místopředsedkyně:

Doc. Ivana Kutá Smatanová, PhD
Ústav fyzikální biologie, Jihočeská univerzita
v Českých Budějovicích
Nový zámek 136
373 33 Nové Hradky
Tel. 00420- 386 361 279
Fax: 00420- 386 361 219
E-mail: ivas@greentech.cz

Tajemník

Doc. RNDr. Radomír Kužel, Csc.
Matematicko-fyzikální fakulta UK,
Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2
Tel: 00420-221911394
Fax: 00420-224911061
E-mail: kuzel@karlov.mff.cuni.cz

Regionální komitét IUCr

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

Doc. RNDr. Radomír Kužel, CSc. (místopředseda)
Katedra fyziky kondenzovaných látek
Matematicko-fyzikální fakulta
Univerzita Karlova v Praze

Doc. Ing. Lubomír Čaplovič, PhD.
Materiálovotechnická fakulta, STU Trnava

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

Ing. Dušan Mikloš, CSc.
Faculty of Chemical Technology
Slovak Technical University, Bratislava

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

Doc. Ivana Kutá Smatanová, PhD
Ústav fyzikální biologie, Jihočeská univerzita
v Českých Budějovicích

Doc. RNDr. Petr Mikulík, PhD
Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita v Brně