



## KRYSTALOGRAFICKÁ SPOLE NOST

### Stručný pohled činnosti v roce 2011

V roce 2011 byla Krystalografická společnost po adatelem i spolupo adatelem tradičních Rozhovor, kolokvia Struktura 2011 a 9. Setkání strukturních biologů.

### Rozhovory, konference

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

#### 287. ROZHOVORY

U. S. Steel Košice, 4. 11.

#### 40 rokov RTG laboratória v U.S. Steel Košice

*P ednášky:*

K. Lacková: Komplexné zlú eniny Cu(II) obsahujúce trikyánmetanid a N-donorové chelátové ligandy, L. Váhovská: Príprava a štruktúrna analýza koordinačných zlú enín Fe(II) a Co(II) s N-donorovými bidentátnymi ligandami, P. Vranec: Štvorcovo-planárne komplexy Pd – analógy cisplatiny a karboplatiny, M. Almáši: Štúdium štruktúry komplexov typu  $[Ln(OR)_3]_n$  použitím HE-XRPD, N. Pavlišáková: Štruktúra vybraných komplexov niklu a kobaltu s 2,2'-dipyridylamínom ako blokujúcim ligandom, I. V tvi ka: Vliv te ení na texturu obalových trubek ze slitiny Zr1Nb zkoumaný neutronovou difrakci, L. Hrab áková: Využitie metodiky EBSD v podmienkach USS Košice, M. erník: História rtg laboratória od roku 1971. innos, výsledky a zaujímavé riešenia - textúr, vnútorných napätí a fázového zloženia.

Exkurze.

*Organizace:* M. erník



288. Rozhovory, V. Sklená



288. Rozhovory, L. Pína

#### 288. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV R v.v.i, 2. 12. 2011

Krystalografie v chemii, fyzice a biologii

*P ednášky:*

I. Kraus: Rentgenové zá ení ve vývoji eské fyziky,



288. Rozhovory



D. Gyepesová



F. Valach



M. Petrák

L. Pína: Rentgenová optika v České republice - historie a současnost, M. Bernánský: Význam momentů v profilové analýze, V. Sklenář: Quo Vadis? NMR as an eminent tool for structural and systems biology, J. Maixner: Laboratorní rentgenové difraktometrie a spektrometrie - historie a současnost, D. Gyepesová: Niektoré aspekty štruktúrneho výskumu vybraných anorganických zlúčenín, F. Valach: Štruktúrne korelácie v chemickej kryštalografii, M. Petrák: Výzkumný ústav anorganické chemie, Ústí nad Labem, R. Kužel: Vzpomínka na přátele československé krystalografie - Prof. Petera Klimanka a Prof. Roberta L. Snydera

Organizace: J. Hašek



T. Samtleben

### Kolokvium - Struktura 2011

Hotel Karel IV, Turnov

14. - 17. 6. 2010

Hlavní témata, přednášky:

Nanomateriály

M. Šlouf: Nanočástice pro vícenásobné imunizace a nukleaci krystalizace polymerů, P. Roupčová: Nanocrystalline materials containing 3d metals for hydrogen storage, P. Brázda:  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  - tvar a distribuce velikosti nanokrystalů připravených v  $\text{SiO}_2$  matrici



L. Sodomka



A. Zorkovská, M. Bernánský, M. Bernánský





P. Bezděka, J. Fiala

### Materiály

J. Drahokoupil: Analysis of highly mobile twin boundary in NiMnGa martensite by X-ray diffraction, J. Kopecký: Ferromagnetic shape memory on the basis of cobalt, D. Šimek: Využití difrakce k charakterizaci pevnosti válcované a tažené feriticko-perlitické oceli, M. Černík: Röntgenová difrakční analýza trosiek. EBSD analýza obalových plechov.

### Fázová analýza

J. Fiala: Kvalitativní a kvantitativní fázová analýza, M. Kotrlý: Zkušenosti s práškovou mikrodifrací ve forenzní praxi

### Fázové transformace, instrumentace

A. Zorkovská: Transformácia kalcitu na aragonit v procese mletia vaje nej skupiny, J. Polák: Pevnostní profil metodou EFG a jejich využití v strukturní analýze.

### Prvková analýza

V. Starý: Elektronová mikroanalýza a některé další metody prvkové analýzy, S. Daniš: Rtg fluorescence, K. Mašek: Metody povrchové a tenkovrstvé analýzy prvkového

složení (XPS, AES, SIMS), difrakce fotoelektron, V. Havránek: Úvod do využití iontových svazků. Rozptyl iontů, metody PIXE, PIGE, protonová mikrosonda. Metoda RBS, iontové kanálování, J. Dohnálek: Identifikace iontů v proteinech.



M. Kotrlý



V. Starý



K. Mašek



V. Havránek

### Struktury

M. Dušek: Constitution isomers of  $[\text{Cp}^*2\text{Mo}2\text{P}2\text{Se}3(\text{CuI})3(\text{CH}_3\text{CN})_n]$ , J. Hašek: Interakce polymer s proteiny - Polymerní strukturní databáze, J. Brynda: Aspartátové proteasy patogení kvasinky *Candida parapsilosis*, M. Pospíšil: Interkalované hydrotalcity, difrakce a modelování, F. Laufek: Krystalografické studium ternárních systém s platinovými kovy

L. Sodomka: Sto šestnáct let využívání rentgenového záření, Urování dokonalosti zrn karbidu titanu a nitridu boru připravených metodou vysokoteplotní samošlácení syntézy, M. Beránek: Metoda dvou záření - experiment, R. Kužel: Textury a napětí v tenkých vrstvách. Vybrané zajímavé případy

### Přístroje:

J. Maršík: Nové možnosti difraktometru Rigaku SmartLab, T. Samtleben: High-brilliance low-maintenance microfocus sources for diffractometry, B. Míček: Produkty firmy Bruker

V rámci kolokvia byl uspořádán kurs fázové analýzy (P. Bezdička, R., Kužel) a také exkurze do Cryturu v Turnově.

### 9. Pehlídka studentských prací z oblasti krystalografie a strukturní analýzy

Součástí kolokvia Struktura 2011 byla též tradiční pehlídka studentských prací. Zúčastnili se jí studenti z různých institucí tentokrát pouze v České republice, kteří prezentovali výsledky diplomových a doktorských prací v oboru rtg strukturní analýzy. Celkem 13 příspěvků z oblastí - proteinová krystalografie, tenké vrstvy, nanokrystalické materiály, materiály (textury a napětí).



J. Dohnálek



J. Hašek



M. Pospíšil



G.Demo

T. Kova

A. Št pánková

M. Barchuk

Z. Pala

J. Mat jová

A. Št pánková: Structural and functional study of bi-functional anhydrolase, T. Kova : Crystallization and X-ray structural analysis of bifunctional nuclease TBN1, G. Demo: Proteiny zapojene do DNA transkripce, J. R ži ka: Studium kyslíkových precipitát v Czochralského k emíku pomocí Laueho rtg difrakce, J. Mat jová: Nanoheteroepitaxy of Ge on Si(001) Studied by X-ray Diffraction, M. Barchuk: Determination of the defects in the a-plane GaN heteroepitaxial layers, L. Horák: Studium Mn intersticiál v (Ga,Mn)As pomocí rtg difrakce s vysokým rozlišením, J. Endres: Kvantové te ky v amorfnní matici, V. Valeš: Nanote ky  $Fe_2O_3/TiO_2$  v Si matici: Struktura a morfologie, T. Brunátová: Studium struktury titanátových nanotrubeek, M. Kr želová: Studium slitin na bázi zirkonia pomocí neutronové difrakce, Z. Pala: Studium hloubkové

distribuce reálné struktury pomocí difrak ních technik, J. Drahokoupil: Fázová transformace v austenitické oceli vyvolaná plastickou deformací.

Hlavními ocen nými byli: Z. Pala, M. Kr želová a J. Drahokoupil (*FJFI VUT Praha*), L. Horák (*MFF UK*), J. R ži ka (*P F MU Brno*), T. Kova a A. Št pánková (*ÚMCHAV R, Praha*)

WWW - <http://www.xray.cz/xray/csca/kol2011/>

Abstrakty p ísp vk :

<http://www.xray.cz/ms/bul2011-2.htm>

Po et ú astník : 63



J. Drahokoupil

M. erník, J. Hybler, M. Kr želová



J. R ži ka, J. Hašek



L. Horák, J. Hašek



J. Endres, J. Hašek



M. Kr želová, J. Hašek

## 9th Discussion in Structural Molecular Biology

Akademické a univerzitní centrum Nové Hradky  
24.-26. 3.

### Hlavní přednášky:

I. Barák: Lipid helices formation in *Bacillus subtilis* cell membrane, P. Malý: Generation of artificial binders with affinity to human cytokines via computer-assisted mutagenesis of a stable protein scaffold and ribosome display selection, J. P ecech elová: Torsion angle dependence of phosphorus chemical shifts in a nucleic acid backbone from combined molecular dynamics and density functional calculations, P. ežá ová: Crystal structures of two protease inhibitors from tick saliva, L. Urbániková: Structural basis for substrate recognition by GH30 glucuronoxylanase from *Erwinia Chrysanthemi*, J. Brynda: Crystal structure of the mouse galectin-4 N-terminal carbohydrate recognition domain, R. Dvorský: Impact of Point Mutations on Protein Functions: Example Case of Ras GTPases

### Krátké přednášky:

P. Dvo ák, J. Prchal, J. Dohnálek, D. Rozbeský, P. Hanc, V. Andrushchenko, L. ežábková, M. Šebela, P. Man, Z. Chval, V. Sychrovský, Z. Futera, V. profant, J. Hudcová,



D. eha, I. Kishko, J. Hašek, A. Št pánková, T. Kova , O. Kroutil, M. Krupí ka, P. Pachel, A. K enek, M. Ruda, O. Sk ehota, J. Houser, R. Etrich

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

Abstrakty p ísp vk :

<http://www.xray.cz/ms/bul2011-1.htm>

Po et ú astník : 122

Po et poster : 46

Od roku 2010 je hlavním organizátorem eská spole nost pro strukturní biologii.



## eská spole nost pro strukturní biologii

Na 8. setkání strukturních biolog byla založena eská spole nost pro strukturní biologii, schváleny stanovy a zvolena v deká rada. Adresa spole nosti je

The Czech Society for Structural Biology  
( eská spole nost pro strukturní biologii)

Víde ská 1083

CZ-142 20 Prague, Czech Republic

fax: +420 296 443 610

I O: 0022869433

V deká rada:

Jan Dohnálek, p edseda

Vladimír Sklená , místop edseda

Bohdan Schneider, pokladník

Rudiger Ettrich, Jind ich Hašek, Richard Hrabal, Tomáš Obšil, lenové.

## V deká rada Krystalografické spole nosti

Ing. Hana Brusová

Laborato e pevné fáze a optické istoty  
Zentiva, a.s.

RNDr. Ji í Brynda, CSc.

Ústav molekulární genetiky  
Akademie v d eské republiky, v.v.i., Praha

Prof. RNDr. Jaroslav Fiala, CSc.

Západo eská univerzita, Plze

Prof. Ing. Nikolaj Ganev, CSc.

Fakulta jaderná a inženýrská VUT, Praha

RNDr. Jind ich Hašek, DrSc.

Ústav makromolekulární chemie  
Akademie v d eské republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Jaromír Hrdý, DrSc.

Fyzikální ústav  
Akademie v d eské republiky, v.v.i., Prah

RNDr. Ji í Hybler, CSc.

Fyzikální ústav  
Akademie v d eské republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Ji í Kulda, CSc.

Institute of Laue-Langevin  
Grenoble, France

Doc. Ivana Kutá Smatanová, PhD

Ústav fyzikální biologie, Jiho eská univerzita  
v eských Bud jovicích

Doc. RNDr. Radomír Kužel, CSc.

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy,  
Praha

Doc. RNDr. Petr Mikulík, PhD

P írodov deká fakulta Masarykovy Univerzity,  
Brno

Ing. Bohdan Schneider, CSc.

Biotechnologický ústav,  
Akademie v d eské republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Zbyn k Šourek, CSc.

Fyzikální ústav  
Akademie v d eské republiky, v.v.i., Praha

## Redakce spole nosti

*asopis spole nosti*

(p vodn Bulletin Krystalografické spole nosti)

vychází pod jménem “Materials Structure in Chemistry, Biology, Physics and Technology”, ISSN 1211-5894.

V deké lánky podléhají recenznímu ízení a jsou p íjí-  
mány v angli tin , eštin i slovenštin . Redak ní rada  
m že zaslaný p ísp vek odmítnout, pokud se domnívá, že  
koncep n nespádá do redak ního plánu. lánky z  
asopisu jsou voln dostupné ve formátu PDF na adrese:  
<http://www.xray.cz/ms>. asopis je za azen do databáze  
voln dostupných elektronických asopis Directory of  
Open Access Journals (<http://www.doaj.org/>).

*Newsletter IUCr*

na základ dohody s IUCr tvrtletn rozesílá všem len m  
spole nosti asopis “Newsletter IUCr”, který je  
vy erpávajícím zdrojem informací o všech aktivitách nám  
p íslušné Mezinárodní krystalografické unie (IUCr).

## INTERNET

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

Vyzýváme všechny leny a ostatní zájemce, aby p ísp li k  
zlepšení formy i obsahu. P ínejmenším tím, že nám oznámí  
odkazy na vlastní WWW stránky.

## Pracovní skupina Struktura a vlastnosti

zajištuje provoz krystalografických databází a zprost ed-  
kovává n které aktivity týkající se programového  
vybavení pro krystalografii a pro molekulární modelování.

Licence jsou pro jednotlivé produkty odlišné. V prvním  
p íblížení platí, že licence jsou platné pro nekomer ní  
uživatele zaregistrované na po íta i, kde je databáze  
instalována (FZÚ, ÚMCH, MFF, STU).

## Synchrotronová sekce

Synchrotronová sekce v rámci Krystalografické spole -  
nosti byla založena v ervnu 2008 na kolokviu Struktura  
2008. Jejím cílem je sdružit uživatele synchrotronového  
zá ení a poskytnout platformu pro vým nu informací  
široké komunitě využívající synchrotronové zá ení, která  
zahrnuje nejen fyziky, ale i chemiky, biology, geology,  
léka e, techniky a pracovníky dalších obor . Momentální  
webová stránka je umíst na <http://www.phys-ics.muni.cz/ufkl/SynSekce>.



## Grantové projekty

Spole nost vítá všechny iniciativy a projekty prospěšné pro rozvoj krystalografie a oboru s ní souvisejících.

## Spolupráce

Spole nost úzce spolupracuje s následujícími odbornými organizacemi: Odborná skupina pro fyziku a chemii tuhých látek, 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 300 Kč, pro studenty a dále chodce pak 100,- Kč ročně.

Poplatek zahrnuje vložné na Rozhovory (4 jednodenní semináře o strukturní analýze), zaslání informatických 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 účastnit se konkurzu na poskytnutí stipendia na konferenci Společnosti a na které další akce na nichž se Společnost podílí. Stipendium může udělit buď organizace nebo výbor pro příslušné akce, nebo může účast na akci dotovat výbor Společnosti. Zpravidla se poskytují slevy vložného;

možnost podat vlastní výzkumný projekt grantovému agentu 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 semináře i konferenci specializovanou na Vámi vybrané téma;

sdílet prostředky k zakoupení i pronájmu společných 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.

## Sekretariát společnosti

činnost společnosti řídí sekretariát společnosti ve složení:

### Prezident:

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  
Fakulta rybářství a ochrany vod, Jihočeská univerzita  
v Českých Budějovicích  
Nový zámek 136  
373 33 Nové Hradce  
Tel. 00420- 386 361 279  
Fax: 00420- 386 361 219  
E-mail: kuta@frov.jcu.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

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

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

Doc. Ing. Lubomír Šplavčík, PhD.  
Materiálově technická fakulta, STU Trnava

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

Doc. Ing. Jozef Kožíšek, CSc.  
Faculty of Chemical Technology  
Slovak Technical University, Bratislava



Doc. Ivana Kutá Smatanová, PhD

Fakulta rybářství a ochrany vod, Jihočeská univerzita  
v Českých Budějovicích

Doc. RNDr. Petr Mikulík, PhD

Přírodovědecká fakulta  
Masarykova univerzita v Brně

Prof. Ing. Nikolaj Ganev, CSc.

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, VUT Praha

*R. Kužel, J. Hašek*



## FEBS Advanced Course „Advanced methods in macromolecular crystallization IV

Akademické a univerzitní centrum Nové Hradce  
25. 6.– 2. 7. 2010

Na úspěšné řadě FEBS PLC kurzů konaných v letech 2004, 2006 a 2008 navázal čtvrtý po řadě poprvé na konci června 2010. Na kurz přijali pozvání přední světoví odborníci z oblasti proteinové krystalografie jako například Prof. Naomi Chayen z Imperial College London (UK), Prof. Martin Caffrey z Trinity College Dublin (Irsko), Dr. Terese Berfors z Uppsala University (Švédsko), Prof. Juan Manuel García-Ruiz z Laboratorio de Estudios Cristalografico (LEC) Edificio BIC-Granada (Španělsko), Prof. Christian Betzel z Univ.-klinikum Hamburg (Německo) a dalších 16 světově uznávaných specialistů. Akce, která byla pořádaná pod záštitou FEBS (Federation of European Biochemical Societies), sponzorovalo 7 zahraničních a 2 české firmy a také Česká a Slovenská Krystalografická společnost. Na základě požadovaných kritérií bylo na kurz vybráno šest studentů z české a devatenáct studentů z ostatních evropských zemí. V dopoledních cyklech přednášek se studenti seznámili s metodami izolace, purifikace a krystalizace proteinů. Obeznamenali se nejen se standardními postupy, ale také s nejnovějšími trendy. V odpoledních hodinách si v rámci praktické výuky vyzkoušeli vše, co se dozvěděli na přednáškách. Praktická cvičení se konala v místnosti kurzu v Laboratoriu biomolekulární krystalogeneze a krystalografie. Studenti si s použitím různých krystalizačních metod (hanging drop & sitting drop vapour diffusion methods, crystallization in gel, streak seeding, aj.) sami vypěstovali krystaly modelových a některých vlastních proteinů, seznámili se s přístrojem využívajícím dynamický rozptyl světla a s jeho aplikací v krystalografii, vyzkoušeli si krystalizovat s pomocí robota zapůjčeného od firmy Douglas Instruments, naučili se o kování a zmrazování

krystaly a správně pracovat s komerčními sadami roztoků. V rámci jednodenního pobytu byl zajištěn kromě vědeckého programu také kulturní společenský program, například návštěva českého Krumlova. Na závěr kurzu byla studenty vyhodnocena jeho odborná a společenská úroveň formou dotazníku a lze konstatovat, že účastníci byli s kurzem velmi spokojeni (98 % studentů označilo kurz jako vynikající) a uvítají další kurzy, které budou v podobném rozsahu probíhat i v následujících letech. Veškeré informace o krystalizačních kurzech pořádaných na Nových Hradech jsou uveřejněny na internetové adrese <http://www.img.cas.cz/igm/cc>.

*Počet účastníků: 25*

*Počet využití: 24*

Abstrakty příspěvků byly otištěny v *Materials Structure*, vol. 17, no. 3a (2010).

<http://www.xray.cz/ms/bul2010-3a.htm>

*Organizátoři:*

Ivana Kutá Smatanová, Pavlína Šezáková, Rolf Hilgenfeld

*Ivana Kutá Smatanová*