

KRYSTALOGRAFICKÁ SPOLEČNOST

Stručný přehled činnosti v roce 2011

V roce 2011 byla Krystalografická společnost pořadatelem či spoluorganizátorem tradičních Rozhovorů, kolokvia Struktura 2011 a 9. Setkání strukturních biologů.

Rozhovory, konference

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

287. ROZHOVORY

U. S. Steel Košice, 4. 11.

40 roků RTG laboratória v U.S. Steel Košice

Přednášky:

K. Lacková: Komplexné zlúčeniny Cu(II) obsahujúce trikyánmetanid a N-donorové chelátové ligandy, L. Váhovská: Príprava a štruktúrna analýza koordinačných zlúčenín 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'-dipyridylaminom ako blokujúcim ligandom, I. Větvíčka: Vliv tečení na texturu obalových trubek ze slitiny Zr1Nb zkoumaný neutronovou difrakce, L. Hrabčáková: Využitie metodiky EBSD v podmienkach USS Košice, M. Černík: História rtg laboratória od roku 1971. Činnosť, výsledky a zaujímavé riešenia - textúr, vnútorných napätí a fázového zloženia.

Exkurze.

Organizace: M. Černík



288. Rozhovory, V. Sklenář



288. Rozhovory, L. Pína

288. ROZHOVORY

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

Krystalografie v chemii, fyzice a biologii

Přednášky:

I. Kraus: Rentgenové záření ve vývoji české fyziky,



288. Rozhovory



D. Gyepesová



F. Valach



M. Petrák

L. Pína: Rentgenová optika v České republice - historie a současnost, M. Čerňanský: Význam momentů v profilové analýze, V. Sklenář: Quo Vadis? NMR as an eminent tool for structural and systems biology, J. Maixner: Laboratoř 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

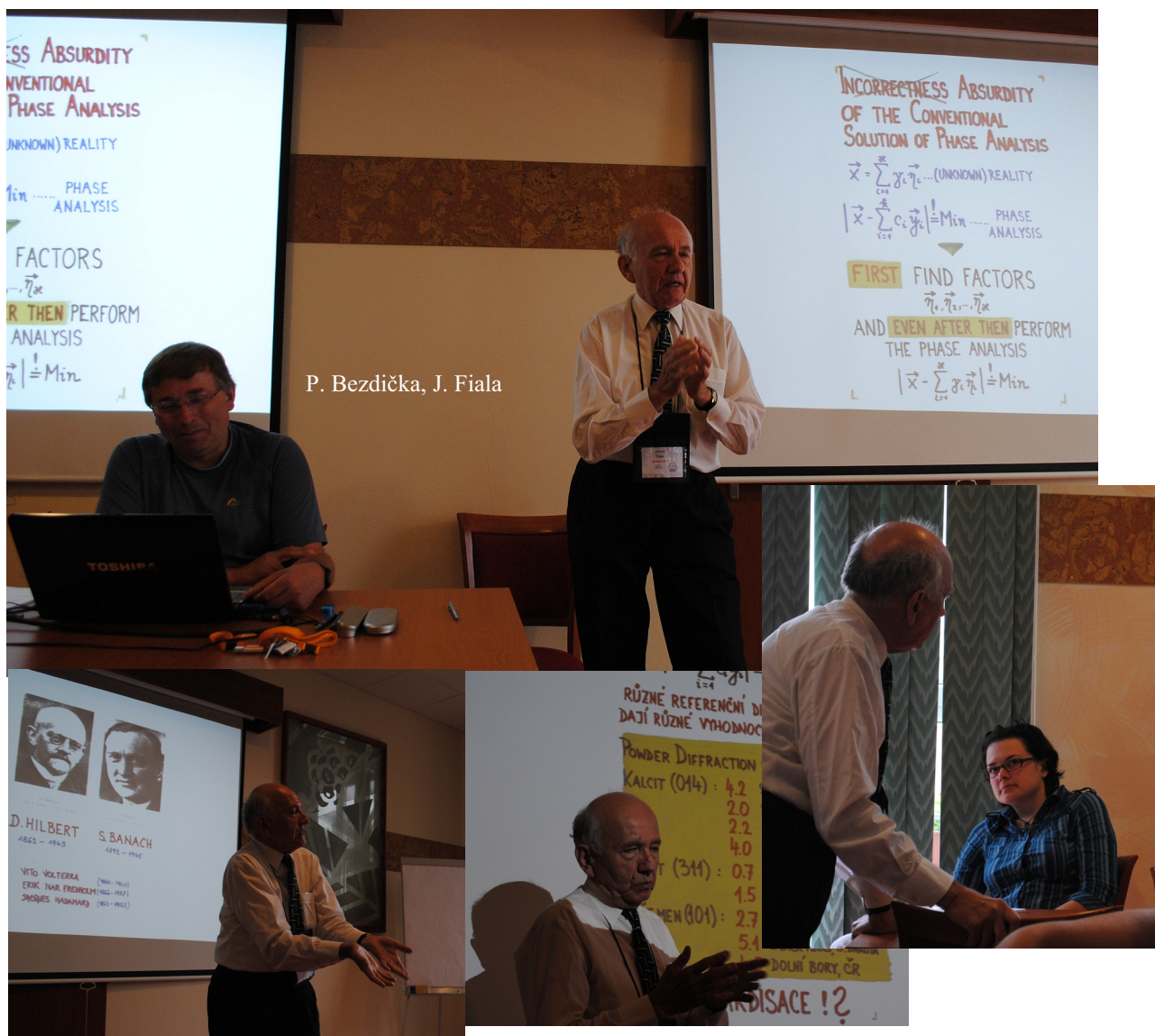
M. Šlouf: Nanočástice pro vícenásobné imunoznačení a nukleaci krystalizace polymerů, P. Roupová: Nanocrystalline materials containing 3d metals for hydrogen storage, P. Brázda: $-\text{Fe}_2\text{O}_3$ - tvar a distribuce velikosti nanokrystalů připravených v SiO_2 matici



L. Sodomka



A. Zorkovská, M. Černík, M. Čerňanský



P. Bezdička, J. Fiala

Materiály

J. Drahokoupil: Analysis of highly mobile twin boundary in NiMnGa martensite by X-ray diffraction, J. Kopeček: Feromagnetické tvarové paměti na bázi kobaltu, 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 vaječnej skupiny, J. Polák: Pěstování safírových profilů metodou EFG a jejich využití při 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 fotoelektronů, 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 polymerů s proteiny - Polymerní strukturní databáze, J. Brynda: Aspartátové proteasy patogení kvasinky *Candida parapsilos*, M. Pospíšil: Interkalované hydrotalcity, difrakce a modelování, F. Laufek: Krystalografické studium ternárních systémů s platinovými kovy

L. Sodomka: Sto šestnáct let využívání rentgenového záření, Určování dokonalosti zrn karbidu titanu a nitridu boru připravených metodou vysokoteplotní samošřírcí se syntézy, M. Čerňanský: 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 microfocuss sources for diffractometry, B. Míč: Produkty firmy Bruker

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

9. Přehledka studentských prací z oblasti krystalografie a strukturní analýzy

Součástí kolokvia Struktura 2011 byla též tradiční přehledka 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 oblasti - proteinová krystalografie, tenké vrstvy, nanokrystalické materiály, materiály (textury a napětí).



J. Dohnálek



J. Hašek



M. Pospíšil



G. Demo

T. Kovaľ

A. Štěpánková

M. Barchuk

Z. Pala

J. Matějová

A. Štěpánková: Structural and functional study of bi-functional anhydrolase, T. Kovaľ: Crystallization and X-ray structural analysis of bifunctional nuclease TBN1, G. Demo: Proteiny zapojene do DNA transkripce, J. Růžička: Studium kyslíkových precipitátů v Czochralského křemíku pomocí Laueho rtg difrakce, J. Matějová: 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 intersticiálů v (Ga,Mn)As pomocí rtg difrakce s vysokým rozlišením, J. Endres: Kvantové tečky v amorfni matici, V. Valeš: Nanotečky Fe₂O₃/TiO₂ v Si matici: Struktura a morfologie, T. Brunátová: Studium struktury titanátových nanotrubeček, M. Krůželová: Studium slitin na bázi zirkonia pomocí neutronové difrakce, Z. Pala: Studium hloubkové

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

Hlavními oceněnými byli: Z. Pala, M. Krůželová a J. Drahokoupil (*FJFI ČVUT Praha*), L. Horák (*MFF UK*), J. Růžička (*PřF MU Brno*), T. Kovaľ a A. Štěpánková (*ÚMCH AV ČR, Praha*)

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

Abstrakty příspěvků:

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

Počet účastníků: 63



J. Drahokoupil

M. Černík, J. Hybler, M. Krůželová



J. Růžička, J. Hašek

L. Horák, J. Hašek



J. Endres, J. Hašek

M. Krůželová, 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. Přecech elová: Torsion angle dependence of phosphorus chemical shifts in a nucleic acid backbone from combined molecular dynamics and density functional calculations, P. Řezáčová: 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. Dvořák, J. Prchal, J. Dohnálek, D. Rozbeský, P. Hanc, V. Andrushchenko, L. Řežábková, M. Šebela, P. Man, Z. Chval, V. Sychrovský, Z. Futera, V. profant, J. Hudcová,



D. Řeha, I. Kishko, J. Hašek, A. Štěpánková, T. Koval', O. Kroutil, M. Krupička, P. Páchl, A. Křenek, M. Ruda, O. Skřehota, J. Houser, R. Etrich

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

Abstrakty příspěvků:

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

Počet účastníků: 122

Počet posterů: 46

Od roku 2010 je hlavním organizátorem Česká společnost pro strukturní biologii.



Česká společnost pro strukturní biologii

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

The Czech Society for Structural Biology
(Česká společnost pro strukturní biologii)
Viedeňská 1083

CZ-142 20 Prague, Czech Republic

fax: +420 296 443 610

IČO: 0022869433

Vědecká rada:

Jan Dohnálek, předseda
Vladimír Sklenář, místopředseda
Bohdan Schneider, pokladník

Rudiger Ettrich, Jindřich Hašek, Richard Hrabal, Tomáš Obšil, členové.

Vědecká rada Krystalografické společnosti

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

Prof. RNDr. Jaroslav Fiala, CSc.

Západočeská univerzita, Plzeň

Prof. 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

RNDr. Jaromír Hrdý, DrSc.

Fyzikální ústav
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Jiří Hybler, CSc.

Fyzikální ústav
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Jiří Kulda, CSc.

Institute of Laue-Langevin
Grenoble, France

Doc. Ivana Kutá Smatanová, PhD

Ústav fyzikální biologie, Jihočeská univerzita
v Českých Budějovicích

Doc. RNDr. Radomír Kužel, CSc.

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy,
Praha

Doc. RNDr. Petr Mikulík, PhD

Přírodovědecká fakulta Masarykovy Univerzity,
Brno

Ing. Bohdan Schneider, CSc.

Biotechnologický ústav,
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Zbyněk Šourek, CSc.

Fyzikální ústav
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha

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 300 Kč, pro studenty a důchodce pak 100,- Kč ročně.

Poplatek zahrnuje vložné na Rozhovory (4 jednodenní semináře o strukturní analýze), zaslání informačních 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 zúčastnit se konkurzu na poskytnutí stipendia na konferenci 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 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:

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
Fakulta rybářství a ochrany vod, Jihočeská univerzita
v Českých Budějovicích
Nový zámek 136
373 33 Nové Hradky
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. (předseda)
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 Čaplovič, PhD.
Materiálovotechnická fakulta, STU Trnava

Prof. RNDr. Juraj Černák, CSc.
Prírodovedecká 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, ČVUT 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 tři ročníky FEBS PLC kurzů konaných v letech 2004, 2006 a 2008 navázal čtvrtý pořádaný poprvé na konci června 2010. Na kurz přijali pozvání přední světoví odborníci z oblasti proteinové krystalografie jako např. Prof. Naomi Chayen z Imperial College London (UK), Prof. Martin Caffrey z Trinity College Dublin (Irsko), Dr. Terese Berfors z Uppsalla 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. Akci, 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 Čech 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 místě kurzu v Laboratoři 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 někteří i 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 očkovat a zmrazovat

krystaly a správně pracovat s komerčními sadami roztoků. V rámci jednodenního pobytu byl zajištěn kromě vědeckého programu také kulturně-spoločenský 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 vyučujících: 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 Řezáčová, Rolf Hilgenfeld

Ivana Kutá Smatanová