



## STRUKTURA 2012 - PROGRAMME

### Monday, June 11

11:00	13:00	Registration		17:00	
13:45		Struktura 2012 - Opening , a short tribute to ing. J. Marek		SL-A4	96
14:00	15:30	<b>Session I</b>	chair: Z. Šourek	Peter Herich ( <i>Katedra fyzikálnej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU Bratislava</i> ) Syntéza nových Cu(III) substituovaných dithiolátových komplexov (CH <sub>3</sub> P(Ph) <sub>3</sub> )[Cu(bdtCl <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ] Synthesis of new Cu(III) substituted dithiolate complexes (CH <sub>3</sub> P(Ph) <sub>3</sub> )[Cu(bdtCl <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ]	
<hr/>				17.20	Break
14.00		L1	80	17:40	
		<b>Stanislav Daniš</b> ( <i>Matematicko-fyzikálna fakulta UK Praha</i> ) <b>100 let rtg difrakce</b> 100 years of X-ray diffraction		SL-A5	97
14.45		L2	65	Peter Vranec ( <i>Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Košice.</i> ) Štruktúry nových Pd(II) komplexov s 5,7- halogenderivát- mi substituovaným 8-hydroxyquinolinom Structures of novel Pd(II) complexes with 5,7-substituted halogenderivatives of 8-hydroxyquinoline	
		<b>Radovan Černý</b> ( <i>Laboratoire de Cristallographie, University of Geneva</i> ) <b>Řešení struktur z prášků</b> Structure solution from powder diffraction		18:00	
15:30		Coffee break		SL-A6	99
16:00	19:00	<b>Session A</b>	chair: I. Císařová, P. Vojtišek	Katarína Lacková ( <i>Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Košice.</i> ) Päťkrátkoordinované komplexy Cu(II) s trikyanometani- dom, alebo akým zklamaním môžu byť výsledky štruktúr- nej analýzy Pentacoordinated Cu(II) complexes with tricyanomethanide, or how disappointed can be the results of structure analysis	
16:00		SL-A1	92	18:20	
		Jaroslav Maixner ( <i>VŠCHT Praha</i> ) Krystalografické studium 10-arylflavínu X-ray single crystal studies of 10-arylflavins		SL-A7	102
16:20		SL-A2	93	Lucia Vahovská ( <i>Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Košice.</i> ) Kryštalové štruktúry komplexov Fe(II) a Co(II) s N-do- norovými bidentálnymi ligandami Crystal structures of Fe(II) and Co(II) complexes with N-donor bidentate ligands	
		Jozef Kožíšek ( <i>Katedra fyzikálnej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU Bratislava</i> ) Experimentálna elektronová štruktúra koordinačných zlú- čenín Experimental Electronic Structure of Coordination Compounds		18:40	
16:40		SL-A3	93	SL-A8	104
		Lenka Kucková ( <i>Katedra fyzikálnej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU Bratislava</i> ) Analýza kryštalovej štruktúry a nábojovej hustoty tetra- zolu Charge density study of tetrazole		Martin Vávra ( <i>Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Košice.</i> ) Kryštalové štruktúry tetrakyanidoplatitanov Cu(II) Crystal structures of copper(II) tetracyanidoplatinates	

16:00 19:00 **Session B**chair: *P. Mikulík, M. Čerňanský*16:00  
SL-B1 107

Miroslav Šlouf  
(*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha*)  
Krystalizace v sendvičových nanokompozitech polymerů PE, PP a POM  
Crystallization in sandwich nanocomposites of PE, PP and POM polymers

16:20  
SL-B2 108

František Laufek  
(*Česká geologická služba, Praha*)  
Krystalografické studium ternárních systému s platino-  
vými kovy  
Crystallographic study of ternary systems with platinum-group  
metals

16:40  
SL-B3 109

Kristina Richterová  
(*Fyzikální ústav AV ČR Praha*)  
Studium atomového uspořádání Ni-Mn-Ga pomocí rent-  
genové difrakce  
X-ray diffraction study of atomic arrangement of Ni-Mn-  
Ga

17:00  
SL-B4 110

Pavla Roupcová  
(*Ústav fyziky materiálu AVCR, Brno*)  
Struktura kvazikrystalických materiálů  
Structure of Quasicrystalline materials

17:20 Break

17:30 18:50 **Session I** chair: *P. Mikulík, M. Čerňanský*

L3 82

Václav Holý  
(*Matematicko-fyzikální fakulta UK Praha*)  
**Softwarové balíky pro výpočet reflektivity a dynamické  
difrakce**  
Our software packages for X-ray reflectivity and dynamical x-ray  
diffraction

19:00 Dinner

20:00 Course on program FOX (Radovan Černý)

**Tuesday, June 12**

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:30 **Session II**chair: *S. Daniš, J. Hybler*8:30  
L4 82

**Jaroslav Fiala**  
(*Západočeská univerzita v Plzni*)  
**Neurčitost výsledků měření I**  
Uncertainty of experimental results

9:15  
L5 83

**Jiří Kulda**  
(*ILL Grenoble, France*)  
**Difuzní rozptyl neutronů a jeho aplikace pro studium  
neuspořádanosti v pevných látkách**  
Neutron diffuse scattering and its application to studies of disorder  
in solids

9:50  
L6 83

**Václav Petříček**  
(*Fyzikální ústav AV ČR Praha*)  
**Struktura ve třech i více dimenzích**  
Structure in three or more dimensions

10:35 *Coffee break*

11:00  
C1  
Stjepan Prugovečki  
(*Panalytical*)  
Empyrean - news and possibilities

11:30  
L7 84

**Mariana Klementová**  
(*Fyzikální ústav AV ČR Praha*)  
**Strukturální upřesnění z dat precesní elektronové dif-  
rakce**  
Structure refinement from precession electron diffraction data

12:00  
SL-C1 116

Ivana Kutá Smatanová  
(*Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích*)  
Porovnání krystalizační schopnosti různých proteinů  
Comparison of different proteins crystallization capability

12:30 Lunch

13.30-14.30  
Schůze vědecké rady Krystalografické společnosti a regio-  
nálního komitétu IUCr - I



14:30 19:00 Course on program Jana (Václav Petříček,  
Michal Dušek)

17:30 18:50 **Session D**

chair: *J. Fiala, N. Ganev*

17:30  
SL-C1 111

Monika Kučeráková  
(*Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT Praha*)  
Studium textur slitin zirkonia metodou neutronové difrakce  
Neutron diffraction examination of textures in zirconium-based alloys

17:50  
SL-C2 112

Jan Říha  
(*Nové technologie - výzkumné centrum, ZČU Plzeň*)  
Fázové transformace zirkonia sledované in-situ rtg difrakcí  
Phase transformations of E110G Zr-alloy observed by "in-situ" XRD

18:10  
SL-C3 114

Jaromír Kopeček  
(*Fyzikální ústav AV ČR Praha*)  
Slitiny Co-Ni-Al s tvarovou pamětí jako komplexní multi-ferroika  
Shape memory alloy Co-Ni-Al as complex multiferroic

18:30  
SL-C4 115

Kamil Kolařík  
(*Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT Praha*)  
Difrakční studium hloubkové distribuce zbytkových napětí v povrchových vrstvách kuličkových bezuhlíkatých ocelích  
Diffraction Study of Residual Stress Depth Distribution in Surface Layers of Shot-blasted Decarburised Steels

19.00 Dinner

20:15 Meeting of the scientific board of Czech and Slovak Crystallographic Association and IUCr Regional Committee of the Czech and Slovak Crystallographers

20:00 Meeting of young crystallographers

## Wednesday, June 13

7:30 8:30 Breakfast

8:30 12:40 **Session III**

chair: *V. Petříček, J. Kožíšek*

8:30  
L8 71

**Miroslav Pospíšil**  
(*Matematicko-fyzikální fakulta UK Praha*)

L9 75

**Petr Kovář**  
(*Matematicko-fyzikální fakulta UK Praha*)  
**Výpočetní postupy v molekulární dynamice**  
Computational procedures in molecular dynamics

10:00  
C2  
Vernon Smith  
(*Bruker AXS*)  
A new ultra-bright X-ray source using liquid-metal jet anode technology

10:30 *Coffee break*

10:50  
L10 86

**Jindřich Hašek**  
(*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha*)  
**Systematická analýza krystalových a molekulárních struktur**  
Systematic analysis of crystal and molecular structures

11:20  
L11 87

**Pavol Skubák**  
(*Leiden Universiteit, the Netherlands*)  
**Riešenie štruktúry makromolekul pomocou viacrozmernej štatistiky**  
Multivariate methods for macromolecular structure solution from experimental phases

11:50  
L12 88

**František Pavelčík**  
(*Veterinární a farmaceutická univerzita Brno*)  
**Semiautomatické hledání ligandu v proteinových strukturách**  
Semi-automatic search of ligands in protein structures

13.00 Lunch

14:00 15:40 **Session D**chair: *J. Hašek, F. Pavelčík*

14:00  
SL-D2  
Pavol Skubák  
(*Leiden Universiteit, the Netherlands*)  
Riešenie štruktúry makromolekúl pomocou viacrozmernej štatistiky II  
Multivariate methods for macromolecular structure solution from experimental phases II

14:30  
SL-D3  
Jiří Brynda  
(*Ústav molekulární genetiky AV ČR*)  
Struktura closo a nido boranových klastrových sloučenin v kontextu komplexu s proteinovou molekulou, pokus o téměř anorganické inhibitory  
Boron Cluster Derivatives as Inhibitors of Important Therapeutic Targets: HIV-1 Protease and Carbonic Anhydrase IX

SL-D4  
Petr Páchl  
(*Ústav molekulární genetiky AV ČR*)  
Strukturální návrh selektivních inhibitorů pro 5-nukleotidáz  
Structure-based drug design of selective 5'-nucleotidases inhibitors

15:00  
SL-D5  
Gabriel Demo  
(*Národní centrum pro výzkum makromolekul, Masarykova univerzita, Brno*)  
Porovnanie kryštalografickej a NMR štruktúry N-termínálnej domény delta podjednotky RNA-polymerázy  
Significant changes between the X-ray structure and NMR structure of subunit of RNA-polymerase

15:20  
SL-D6  
Andrea Štěpánková  
(*Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT Praha*)  
Strukturální a biochemická data enzymu schopného degradace organofosfátů  
The structural and biochemical data of enzyme capable of organophosphates degradation

15:40 Break

16:00  
Course on semi-automatic search of ligands in protein structures (František Pavelčík, Jiří Václavík)

14:00 15:40 **Session E**chair: *R. Kužel, M. Dopita*

14:00  
SL-E1  
Zdeněk Matěj  
(*Matematicko-fyzikální fakulta UK Praha*)  
Modelování rozšíření difrakčních profilů vlivem defektů mřížky  
Modelling effects of small crystallite size and lattice defects on powder diffraction lines

14:30  
SL-E2  
Jan Drahokoupil  
(*Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT Praha*)  
Program pro výpočet makroskopických napětí  
The program for macroscopic stress analysis

15:20  
SL-E3  
Martin Černík  
(*US Steel Košice*)  
Použitie programov na spresnovanie difrakčných záznamov pri riešení oxidických vrstiev na žiaromateriáloch  
Application of Diffraction Pattern Refinement Software for Analyses of Oxide Layers on Refractories

15:50 Break

16.15 Course on program MSTRUCT (Zdeněk Matěj)

19.00 Assembly of the CSCA members

20:00 Dinner



## Thursday, June 23

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:40 **Session VI**

chair: *J. Kulda, Z. Šourek*

10:00

C3

Peter Oberta

*(Rigaku)*

Rigaku přístroje pro SAXS

*SAXS Rigaku Instruments*

10:30 *Coffee break*

8:30

L13

**Jaroslav Fiala**

*(Západočeská univerzita v Plzni)*

**Neurčitost výsledků měření I**

Uncertainty of experimental results

82

10:50

L15

**Lukáš Horák**

*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*

**Simulace map recipročního prostoru z elastických deformačních polí v periodických nanostrukturách**

Simulation of reciprocal space maps from elastic strain field in periodical nanostructures

90

9:20

L14

**Marian Čerňanský**

*(Fyzikální ústav AV ČR Praha)*

**Popis difrakčních profilu pomocí pojmu matematické statistiky**

Description of Diffraction Profiles by Concepts of the Mathematical Statistics

89

11:30 Course on program Jana

13.00 Lunch

*Afternoon*

Possible continuation of courses