



STRUKTURA 2013 - PROGRAMME

Monday, September 9

11:00 13:30 Registration

13:45 Struktura 2013 - Opening

14:00 15:30 **Course on experimental techniques**

chair: *J. Hašek*

Václav Petříček

(*Fyzikální ústav AVČR, Praha*)

Principy difrakčních metod, zpracování dat, korekce

Principles of diffraction methods, data reduction and corrections

Symmetry and determination of space group

16:00 **Session I**

chair: *R. Kužel*

16.00

L1

59

Jan Ilavský

(*Argonne National Laboratory, Chicago, USA*)

Introduction to SAXS, fundamentals, instrumentation, applications

17.30 *Break*

17.40

L2

Peter Laggner

(*Bruker AXS*)

SAXS - Magnetic resonance (NMR/ESR) - Crystallography. The Magic Triangle in Structural Biology

18:30

L3

Martin Černohorský

(*Brno*)

Z minulých kongresů IUCr

From past IUCr congresses

19:00 Dinner

20:00

Jan Ilavský

(*Argonne National Laboratory, Chicago, USA*)

USAXS/SAXS/WAXS Instrument

Demonstration of SAXS evaluation

Tuesday, September 10

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:30 **Session II**

chair: *P. Mikulík, Z. Šourek*

8:30

L4

60

Václav Holý

(*Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha*)

GISAXS - teorie, experimentální realizace, některé výsledky

GISAXS – theory, experimental realization and some results

9:20

L5

61

Edmund Dobročka

(*Elektrotechnický ústav SAV, Bratislava*)

Grazing incidence X-ray diffraction: studium hloubkového profilu chemického složení

Grazing incidence X-ray diffraction: study of depth distribution of chemical phase concentration

9:45

L6

63

Matej Jergel

(*Fyzikálny ústav SAV, Bratislava*)

Aplikácia malouhlového rtg rozptylu na štúdium samosporiadania nanočastíc na rozhraní kvapalina-vzduch

GISAXS application to a study of the nanoparticle self-assembly at the air-water interface

10:10

L7

66

Jiří Novák

(*CEITEC, Masarykova univerzita Brno*)

Růst a struktura tenkých filmů organických polovodičů: GISAXS studie in-situ v reálném čase

Growth and structure of thin films of organic semiconductors: GISAXS study in-situ in real time

10:00 10:30 **Course on experimental techniques**

small hall

chair: *J. Hašek*

Václav Petříček

(*Fyzikální ústav AVČR, Praha*)

Zpřesnění struktur, dvojčatění, modulace

Structure refinement, twinning, modulation

10:30 *Coffee break*

**10. studentská přehlídka**

student symposium

10:50 12:40 **Session I**chair: *V. Holý, M. Jergel*

10:50

S1

96

Jiří Růžička*(Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně)*

Studium manganem dopovaných topologických izolátorů Bi_2Se_3 a Bi_2Te_3 pomocí rtg absorpční spektroskopie
XAFS study of Mn-doped Bi_2Se_3 and Bi_2Te_3 topological insulators

11:10

S2

99

Jan Endres*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*

Kinetické Monte Carlo simulace růstu multivrstev kvantových teček Ge v amorfní matici
Kinetic Monte Carlo simulations of growth of Ge quantum dots in amorphous matrix

11:30

S3

101

Jakub Rozbořil*(Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně)*

Strukturální vlastnosti epitaxních Ge mikrokrystalů na SiC
Structural properties of epitaxial Ge microcrystals on Si

11:50

S4

102

Václav Valeš*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*

Nanočástice $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2$ - komplexní strukturální studium
 $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{TiO}_2$ nanoparticles – a complex structural study

12:10

S5

104

Tereza Brunátová*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*

Studium struktury a teplotní stability titanátových nanotrubeček
Study of high temperature phase of titanate nanotubes

12:30 Lunch

13:40 15:20 **Session II**chair: *E. Dobročka, M. Dopita*

13:40

S6

105

Monika Kučeráková*(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)*

Studium textur slitin zirkonia neutronovou a rentgenovou difrakcí

Neutron and X-ray diffraction study of textures of Zr-alloys

14:00

S7

107

Jiří Čapek*(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)*

Analýza stavu zbytkové napjatosti texturovaných materiálů

Analysis of residual stresses in textured materials

14:20

S8

108

Kristína Richterová*(Fyzikální ústav AVČR, Praha)*

Výzkum struktury Heuslerových sloučenin

Investigation of structure of Heusler compounds

14:40

S9

110

Jan Bárta*(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)*

Význam práškové difrakce při přípravě oxidových nanomateriálů

Importance of XRPD for chemical synthesis of oxide nanomaterials

15:00

S10

111

Ivan Větvíčka*(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)*

Creep textures of water-water nuclear power reactors cladding tubes made of Zr1Nb alloy examined by neutron diffraction supplemented by metallographic research of hydrides

15:20 Break

15:50 16:10 **Session III**chair: *B. Schneider, J. Hašek*

15:50

S11

112

Jan Stránský*(Ústav makromolekulární chemie AVČR, Praha)*

Strukturální rysy a regulační znaky rostlinné nukleázy TBN1

Structural features and regulatory signs of plant nuclease TBN1

16:10

S12

116

Tatsiana Holubeva*(Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích)*

Isolation and crystallization of PSII from higher plants with different content of detergent



16:30 S13	116	Iuliia Iermak (<i>Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích</i>) Crystallization of the members of multistep signalling system from <i>Arabidopsis thaliana</i>
16:50 S14	117	Oksana Degtjarik (<i>Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích</i>) Structural characterization of the members of the multistep signaling system from <i>A. thaliana</i>
17:10		Break
17:30		18:50 Session IV chair: <i>J. Brynda, I. Kutá Smatanová</i>
<hr/>		
17:30 S15	118	Katsiaryna Tratsiak (<i>Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích</i>) Crystal structure of haloalkane dehalogenase DpcA from psychrophilic <i>Psychrobacter cryohalolentis</i> K5
17:50 S16	120	Ekaterina Tutubalina (<i>Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích</i>) Using Ionic Liquids in Protein Crystallization
18:10 S17	121	Jana Pisáčková (<i>Ústav molekulární genetiky AVČR, Praha</i>) Towards Structures Of Antibodies, Receptors and Transcription Factors
18:30 S18	123	Gabriel Demo (<i>Národní centrum pro výzkum biomolekul, Masarykova univerzita v Brně</i>) Krystalizace a rtg analýza beta-D-mannosidázy z <i>Aspergillus Niger</i> Crystallization and X-ray analysis of beta-D-mannosidase from <i>Aspergillus Niger</i>
<hr/>		
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, September 11

7:30 8:30 Breakfast

8:30 9:20 **Course on experimental techniques**chair: *J. Hašek*

L8

Jiří Kulda

(ILL Grenoble)

Rozptyl neutronů: základy techniky a využití ve strukturní analýze

Neutron scattering: fundamentals of technique and application in structure analysis

9:20 10:15 **Session III**chair: *J. Ilavský*

9:20

L9

67

Pavel Strunz*(Ústav jaderné fyziky AVČR, Řež u Prahy)*Příspěvek SANS k vývoji některých nových materiálů
Contribution of SANS to development of new materials

9:55

L10

69

Vasyl Ryukhtin*(Ústav jaderné fyziky AVČR, Řež u Prahy)*

Utilization of SANS for investigation of magnetic structures and dynamics

10:15 *Coffee break*10:40 12:45 **Session IV**chair: *N. Ganev, M. Čerňanský*

10:40

L11

70

Vasyl Ryukhtin*(Ústav jaderné fyziky AVČR, Řež u Prahy)*

SANS experiment on superplastic ceramics

11:00

L12

70

Václav Holý*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*

Rtg studium nukleace a růstu precipitátů omega fáze v titanových slitinách

X-ray study of nucleation and growth of omegaphase precipitates in Ti alloys



11:25 L13 Mojmír Meduňa (<i>Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Brno</i>) Skenovací rtg submikronová difrakce na 3D hetero-epitaxních mikrokrystalech Scanning x-ray submicron diffraction on 3D heteroepitaxial microcrystals	71	15:30 Break	
11:50 L14 Zdeněk Matěj (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Difraktometr Rigaku RAPID: orientování a indexování velkých kompaktních krystalů v geometrii na odraz Cylindrical image plate diffractometer – orienting and indexing of large compact samples in reflection mode	72	16:00 18:00 Session IV-a chair: <i>J. Maixner, D. Šimek</i>	
<hr/>			
10:40 12:10 Course on experimental techniques <i>small hall</i> Jiří Brynda (<i>Ústav organické chemie a biochemie AVČR, Praha</i>) Proteinová krystalografie - indexace, výpočty intenzity měřené plošnými detektory, určení struktury Protein crystallography - Practical examples. Indexation, calculation of intensities measured by area detectors, structure determination	chair: <i>J. Hašek</i>	16:00 L16 Marian Čerňanský (<i>Fyzikální ústav AVČR, Praha</i>) Určování velikosti krystalitů a mikronapětí z profilů difrakčních linií Determination of crystallite size and microstrains from powder diffraction line profiles	75
<hr/>			
12:15 L15 Peter Oberta (<i>Fyzikální ústav AVČR, Praha Rigaku Innovative Technologie, Praha</i>) SAXS portfolio @ Rigaku	75	16:25 L17 Pavla Roupová (<i>VUT Brno</i>) Velikost částic a morfologie práškových materiálů Particle size and morphology of powder materials	77
<hr/>			
12.50 Lunch		16:50 L18 Milan Dopita (<i>Bergakademie Technical University Freiberg</i>) Rtg rozptyl na strukturách turbostratického uhlíku X-ray scattering on turbostratic carbon structures	77
<hr/>			
14:00 15:30 Course on experimental techniques 14:00 Karla Fejfarová (<i>Ústav makromolekulární chemie AVČR, Praha</i>) Zdroje rtg záření X-ray sources	chair: <i>J. Hašek</i>	17:15 L19 Jan Filip (<i>Univerzita Palackého v Olomouci</i>) Využití vysokoteplotní RTG difrakce pro přípravu a charakterizaci kompozitních (nano)materiálů obsahujících nanočástice elementárního železa Use of high-temperature X-ray diffraction for preparation and characterization of composite (nano)materials containing nanoparticles of elementary iron	79
<hr/>			
14:30 Tereza Skálová (<i>Ústav makromolekulární chemie AVČR, Praha</i>) Detektory užívané při měření pro řešení struktur Detectors of X-rays used for structure determination		17:40 L20 Anna Zorkovská (<i>Ústav geotechniky Košice</i>) Štruktúrna charakterizácia mechanochemicky syntetizovaných polovodičových PbS nanokrystalov Structural characterization of mechanochemically synthesized PbS nanocrystals	79
<hr/>			
15:00 Pavlna Řezáčová (<i>Ústav organické chemie a biochemie AVČR, Praha</i>) Programy pro analýzu a validaci krystalových struktur bílkovin Programs for analysis and validation of protein crystal structures		15:50 18:00 Session IV-b chair: <i>J. Hašek, P. Řezáčová</i>	
<hr/>			
		15:50 Tomáš Koval' (<i>Ústav makromolekulární chemie AVČR, Praha</i>) Makromolekulární stanice na synchrotronu BESSY a XFEL Macromolecular beamlines at synchrotrons BESSY, XFEL	



16:20			Thursday, September 12
L21	82		
Bohdan Schneider (<i>Biotechnologický ústav AVČR, Praha</i>)			7:30 8:30 Breakfast
Bioinformatická analýza krystalových komplexů protein-DNA Bioinformatic analysis of protein/DNA complexes			8:30 9:00 Course on experimental techniques chair: <i>J. Hašek</i>
16:45			Radomír Kužel (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>)
L22	82		Prášková difrakce, instrumentace, vyhodnocení Powder diffraction, instrumentation, evaluation
Jiří Brynda (<i>Ústav organické chemie a biochemie AVČR, Praha</i>)			9:00 10:40 Session V chair: <i>S. Daniš</i>
Selektivní inhibitory 5'-nukleotidáz Selective inhibitors of 5'-nucleotidases			
17:10			
L23	83		9:00
Ivana Kutá Smatanová (<i>Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích</i>)			L25 85
Krystalografická studia vybraných halogenalkandehalogenas Crystallographic studies of selected halogenalkandehalogenases			Jan Drahekoupil (<i>Fyzikální ústav AV CR Praha</i>) Využití výpočetních metod při studiu struktury Use of diffraction methods for study of structure
17:35			9:25
L24	84		L26 86
Radka Chaloupková (<i>Loschmidovy laboratoře, Ústav experimentální biologie, Brno</i>)			Lubomír Smrček (<i>Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava</i>) Spresňovanie štruktúr z prášků minimalizáciou celkovej energie Structure refinement by total energy minimization
Modification of activity, specificity and stability of haloalkane dehalogenases by engineering of buried halide-binding sites			10:10
			L27 88
16.15			Stjepan Prugovečki (<i>Panalytical</i>) Extending the SAXS capabilities of the multi-purpose Empyrean X-ray diffraction platform
Pavel Strunz, Vasyl Ryukhtin (<i>Ústav jaderné fyziky AVČR, Řež u Prahy</i>)			
Demonstrace vyhodnocení experimentů SANS Demonstration of SANS evaluation			10:40 <i>Break</i>
			11:00 12:45 Session VI chair: <i>J. Kameníček, J. Drahekoupil</i>
19:00 Assembly of the CSCA members			
20:00 Dinner			
			11:00
			L28 88
			František Laufek (<i>Česká geologická služba, Praha</i>) Krystalografické studium ternárního systému Pd-Ag-Te Crystallographic study of the ternary system Pd-Ag-Te
			11:20
			L29 89
			Jaroslav Maixner (<i>VŠCHT Praha</i>) Krystalová struktura K ₂ HPO ₄ z práškových dat Crystal structure of K ₂ HPO ₄ from powder data



11:40 L30	90	Structure, microstructure and residual stresses in boride layers of steels
Daniel Šimek (<i>Bergakademie Technical University Freiberg</i>) Využití rtg difrakce k charakterizaci pevnosti feriticko-perlitických ocelí Exploitation of X-ray diffraction in characterisation of C45 ferritic-pearlitic steel properties		
12:00 L31	91	11:00 12:30 Course on experimental techniques <i>small hall</i> chair: <i>J. Hašek</i> Jiří Brynda (<i>Ústav organické chemie a biochemie AVČR, Praha</i>) Proteinová krystalografie - indexace, výpočty intenzity měřené plošnými detektory, určení struktury Protein crystallography - Practical examples. Indexation, calculation of intensities measured by area detectors, structure determination
12:20 L32	93	12:45 Closure 13.00 Lunch
Zdeněk Pala (<i>Ústav geotechniky Košice</i>) Struktura, mikrostruktura a zbytková napětí v boridovaných vrstvách ocelí		