



# STRUKTURA 2014 - PROGRAMME

## Monday, June 9

11:00 13:00 Registration

13:00 Struktura 2014 - Opening (I. Šanc, starosta Kutné Hory), Mezinárodní rok krystalografie (R. Kužel)

13:20 15:15 Session I

chair: *S. Daniš*

13:20

**Ivo Kraus**

(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)

**Prof. Adéla Kochanovská**

13:50

video -

Kryštaly a štrukturálna analýza (1979) (S. Ďurovič, D. Mikloš)

Crystals and structure analysis (1979)

14:10

**Josef Loub, Milan Rieder**

Počátky rtg difrakce na Albertově (Přírodovědecká fakulta UK)

14:40

L1

63

**Marek Kotrlý**

(Kriminalistický ústav Praha)

**Fázová analýza ve forenzní oblasti**

Phase analysis in forensic science

15:15 Coffee break, refreshment

15:45 17:00 Session II

chair: *M. Rieder*

15:45

SL1

65

**František Laufek**

(Česká geologická služba Praha)

Příspěvek ke krystalografii Ag-Pd chalkogenidů

Contribution to crystallography of Ag-Pd chalcogenides

16:10

SL2

65

**Miroslav Pospíšil**

(Matematicko-fyzikální fakulta UK v Praze)

Molekulární simulace vrstevnatých struktur

Molecular simulations of layered structures

16:35

SL3

67

**Marian Čerňanský**

(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)

Určování amorfního podílu v částečně krystalických materiálech

Determination of amorphous fraction in partially polycrystalline materials

17:00 18:15 Session III

chair: *J. Hašek*

17:00

SL4

70

**Jan Dohnálek**

(Biotechnologický ústav AV ČR, Praha)

Krystalografie enzymů

Crystallography of enzymes

17:25

SL5

71

**Gabriel Demo**

(Ceitec, Masarykova univerzita v Brně)

Proteinové struktury novo-odhalených bakteriálnych lektinových rodín

Protein structures of newly-discovered bacterial lectine families

17:50

SL6

72

**Iulia Iermak**

(Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích)

Structural characterization of glyceraldehyde dehydrogenase from *Thermoplasma acidophilum*

18:20 Dinner

19:30 Meeting of the scientific board of Czech and Slovak Crystallographic Association

19:30 Meeting of young crystallographers

**Tuesday, June 10**

7:30 8:30 Breakfast

**8:30 10:30 Session IV**chair: *J. Dohnálek, J. Kopeček*

8:30

L2

73

**Jindřich Hašek**

(Ústav makromolekulární chemie, Biotechnologický ústav AV ČR, Praha)

**Pokroky proteinové krystalografie**

Advances of protein crystallography

9:05

L3

75

**Lukáš Palatinus**

(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)

**Upřesnění krystalových struktur z dat elektronové difrakční tomografie**

Crystal structure refinement from electron diffraction tomography

9:40

SL7

78

**Mariana Klementová**

(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)

Elektronová difrakční tomografie MgZn precipitátů v Mg matrici

Electron diffraction tomography of MgZn precipitates in Mg matrix

10:05

SL8

79

**Miroslav Šlouf**

(Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha)

Využití Fourierovy transformace v elektronové mikroskopii

Application of Fourier transformation in electron microscopy

10:30 Coffee break

**11:00 12:15 Session V**chair: *J. Dohnálek, J. Kopeček*

11:00

L4

80

**Břetislav Rus**

(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)

**ELI - unikátní laserové centrum v ČR**

ELI - unique laser centre in Czech Republic

11:45

L5

81

**Peter Oberta**

(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)

**Využití difrakce na dokonalých krystalech ke zkracování FEL pulzu a měření jejich délky**

Use of diffraction on perfect crystals for shortening of FEL pulses and measurement of their length

12:20 Lunch

**13:45 15:20 Session VI**chair: *N. Ganev, M. Čerňanský*

13:45

SL9

82

**Martin Černík**

(U.S.Steel Košice)

Röntgenová difrakčná analýza keramických materiálov používaných v U.S.Steel Košice

X-ray diffraction analysis of refractory materials used in U.S.Steel Košice

14:10

SL10

84

**Monika Kučeráková**

(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)

Studium textury zirkoniových vzorků deformovaných jednoosým tahem pomocí neutronové a rentgenové difrakcie

Neutron and X-ray diffraction study of zirconium samples deformed by uniaxial tension

14:35

SL11

87

**Jan Čapek**

(Matematicko-fyzikální fakulta UK v Praze)

Vývoj dvojčatění v horčíku v závislosti na směru namáhání

Twinning evolution as a function of loading direction in magnesium

15:00

SL12

89

**Gergely Farkas**

(Matematicko-fyzikální fakulta UK v Praze)

Studium horčíkových kompozitů neutronovou difraccí

Study of magnesium composites by neutron diffraction method

15:25

SL13

89

**Jaromír Kopeček**

(Fyzikální ústav AV ČR Praha)

Slitiny s tvarovou pamětí připravené různými metodami

Shape-memory alloys prepared by different techniques



|   |                           |   |                     |
|---|---------------------------|---|---------------------|
| 15:50   | Coffee break, refreshment | 9:00  |                     |
| 16:10 17:30   | <b>Session VII</b>        | SL17  | 95                  |
|   | chair: <i>F. Laufek</i>   | <b>Stanislav Daniš</b>  |                     |
|   |                           | ( <i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i> )                                |                     |
|   |                           | Určování tloušťky tenkých vrstev pomocí XRD, XRF a XRR                            |                     |
|   |                           | Film thickness determination by XRD, XRR and XRF                                  |                     |
| 16:10   |                           | 9:20  |                     |
| S14   |                           | SL18  | 97                  |
| <b>Roman Skála</b>  |                           | <b>Jan Drahokoupil</b>  |                     |
| ( <i>Geologický ústav AV ČR, Praha</i> )  |                           | ( <i>Fyzikální ústav AV CR Praha</i> )  |                     |
| Studium experimentálně dynamicky stlačeného dolomitu pomocí TEM a rtg práškové difrakce   |                           | Měření mřížových parametrů monokrystalů a tenkých vrstev                          |                     |
| Study of experimentally dynamically compressed dolomite using TEM and powder diffraction  |                           | Measurement of lattice parameters of single crystals and thin films               |                     |
| 16:35   |                           | 9:50  | <i>Coffee break</i> |
| S15   |                           | 10:20 12:40   | <b>Session IX</b>   |
| <b>Zdeněk Matěj</b>   |                           | chair: <i>R. Kužel, Z. Šourek</i>   |                     |
| ( <i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i> )  |                           |   |                     |
| Extrakce profilových parametrů jednotlivých difrakčních linií pomocí programu MSTRUCT - aplikace na materiály s anizotropním rozšířením               |                           |   |                     |
| Extraction of profile parameters of individual diffraction lines with the program MSTRUCT - application on materials with anisotropic line broadening |                           |   |                     |
| 17:00   |                           | 10:20   |                     |
| SL16  |                           | CL1   | 98                  |
| <b>Jiří Čapek</b>   |                           | <b>Marcus Winter</b>  |                     |
| ( <i>Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha</i> )   |                           | ( <i>Agilent</i> )  |                     |
| Uživatelské programy pro difrakční experimenty  |                           | Advances in X-ray crystallography   |                     |
| Auxiliary programs for diffraction experiments  |                           |   |                     |
| 17.30 Assembly of the CSCA members  |                           | 10:50   |                     |
| 18.30 Dinner  |                           | CL2   | 98                  |
|   |                           | <b>Stjepan Prugovečki</b>   |                     |
|   |                           | ( <i>Panalytical</i> )  |                     |
|   |                           | XRD news from Panalytical   |                     |
|   |                           | 11:20   |                     |
|   |                           | CL3   | 99                  |
|   |                           | <b>André Beerlink</b>   |                     |
|   |                           | ( <i>Incoatec</i> )   |                     |
|   |                           | Upgrading Home-Lab X-ray Diffractometers with Incoatec's Unique Microfocus Source |                     |
|   |                           | 11:50   |                     |
|   |                           | CL4   |                     |
|   |                           | <b>Peter Oberta</b>   |                     |
|   |                           | ( <i>Rigaku Innovative Technologies, Praha</i> )                                  |                     |
|   |                           | Rigaku EUV/RTG optika a detektory   |                     |
|   |                           | Rigaku EUV/X-ray optics and detectors   |                     |
| 8:30  |                           | 12:20   |                     |
| L6  |                           | CL5   |                     |
| <b>Stjepan Prugovečki</b>   |                           | <b>Boris Míč</b>  |                     |
| ( <i>Panalytical</i> )  |                           | ( <i>Měřicí technika Morava</i> )   |                     |
| Powder Diffraction in everyday life   |                           | Detektor LynxEye XE a další novinky od Bruker AXS                                 |                     |
|   |                           | Detector LynxEye XE and other news from Bruker AXS                                |                     |
|   |                           | 12.45   | Lunch               |



## 16:00 18:10 Session X

chair: *M. Černík, P. Bezdička*

|   |        |  |
|---|--------|--|
| 16:00   |        |  |
| SL19  | 100    |  |
| <b>Pavla Roupcová</b>   |        |  |
| (Ceitec, VUT Brno)  |        |  |
| Tepelná stabilita mleté slitiny Fe-Al   |        |  |
| Thermal stability of ball-milled FeAl alloy   |        |  |
| 16:25   |        |  |
| SL20  | 102    |  |
| <b>Josef Kašlík</b>   |        |  |
| (Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci)   |        |  |
| RTG prášková difracce jako nástroj pro in-situ monitorování termicky indukovaných transformací v pevné fázi |        |  |
| X-ray diffraction as a tool for in-situ monitoring of thermally induced phase transitions                   |        |  |
| 16:50   |        |  |
| SL21  | 103    |  |
| <b>Milan Dopita</b>   |        |  |
| (Bergakademie Technical University Freiberg)  |        |  |
| Mikrostruktura a teplotní vývoj turbostratického uhlíku studované různými analytickými metodami             |        |  |
| Microstructure and thermal evolution of turbostratic carbon studied by different analytical methods         |        |  |
| 17:15   |        |  |
| SL22  | 105    |  |
| <b>Michael Barchuk</b>  |        |  |
| (Bergakademie Technical University Freiberg)  |        |  |
| Investigation of microstructure defects in HTPVE grown polar GaN layers                                     |        |  |
| 17:40   |        |  |
| SL23  | 107    |  |
| <b>Lukáš Horák</b>  |        |  |
| (Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)   |        |  |
| Strukturní studium SrIrO <sub>3</sub>   |        |  |
| Structural study of SrIrO <sub>3</sub>  |        |  |
| 18:00   | Dinner |  |

## Thursday, June 12

7:30 8:30 Breakfast

## 8:30 10:40 Session XI

chair: *P. Vojtíšek, J. Hybler*

|  |                                       |  |
|--|---------------------------------------|--|
| 8:30   |                                       |  |
| L7   | 108                                   |  |
| <b>Michal Dušek</b>  |                                       |  |
| (Fyzikální ústav AV ČR Praha)  |                                       |  |
| Před komplikovanými látkami není úniku (ukázky podivuhodných struktur)                 |                                       |  |
| There is no escape from complicated compounds (examples of striking structures)        |                                       |  |
| 9:05   |                                       |  |
| L8   | 109                                   |  |
| <b>Ján Moncol'</b>   |                                       |  |
| (Fakulta chemickej a potravinárskej technologie STU, Bratislava)                       |                                       |  |
| Neporiadky (disorders): problémy alebo nová informácia v chemickej kryštalografii?     |                                       |  |
| Disorders: Problems or new information in chemical crystallography                     |                                       |  |
| 9:40   |                                       |  |
| SL24   | 111                                   |  |
| <b>Petr Štěpnička</b>  |                                       |  |
| (Přírodovědecká fakulta UK v Praze)  |                                       |  |
| Strukturní překvapení v organokovové chemii  |                                       |  |
| Structural surprise in organometallic chemistry  |                                       |  |
| 10:05  |                                       |  |
| L9   | 112                                   |  |
| <b>Michal Hušák</b>  |                                       |  |
| (VŠCHT Praha)  |                                       |  |
| Limitní hranice složitosti při řešení struktury z práškových difrakčních dat           |                                       |  |
| Breaking the problem complexity limits for powder diffraction based structure solution |                                       |  |
| 10:40  | Coffee break                          |  |
| 11:10  | 12:50 Session XII                     |  |
|  | chair: <i>M. Šlouf, M. Klementová</i> |  |
| 11:10  |                                       |  |
| SL25   | 113                                   |  |
| <b>Anna Zorkovská</b>  |                                       |  |
| (Ústav geotechniky Košice)   |                                       |  |
| Polymorfismus sircíku arsenu - potenciální protirakovinné efekty                       |                                       |  |
| Polymorphs of arsenic sulfide - potential anticancer effects                           |                                       |  |



|  |         |  |
|--|---------|--|
| 11:35  |         | X-ray diffraction study on nanofibre polymeric materials |
| SL26   | 116     |  |
| <b>Anna Kallistová</b>   |         |  |
| ( <i>Přírodovědecká fakulta UK v Praze</i> )   |         |  |
| Závislost mikrostruktury dentálního hydroxylapatitu na délce vývoje zuba                   |         |  |
| The influence of the time of tooth development on microstructure of dental hydroxylapatite |         |  |
| 12:00  |         |  |
| SL27   | 116     |  |
| <b>Antonín Čajka, Pavla Čapková</b>  |         |  |
| ( <i>Univerzita J.E. Purkyně, Ústí nad Labem</i> )   |         |  |
| Rtg difrakční studium nanovlákkenných polymerních materiálů                                |         |  |
| 12:25  |         |  |
| SL28   | 118     |  |
| <b>Tereza Brunátová</b>  |         |  |
| ( <i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i> )   |         |  |
| Studium vysokoteplotní transformace titanátových nanotubek                                 |         |  |
| Study of high temperature transformation of titanate nanotubes                             |         |  |
| <hr/>  |         |  |
| 12:50  | Closure |  |
| 13.00  | Lunch   |  |
| <hr/>  |         |  |

