

KRYSTALOGRAFICKÁ SPOLE NOST

Stručný přehled činnosti v letech 2012–2014

V letech 2012-2014 byla Krystalografická společnost po adatelem i spolupo adatelem tradičních Rozhovorů, kolokvií Struktura a dalších akcí.

Rozhovory, konference

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

289. ROZHOVORY

MFF UK, Praha, 1. 2. 2012

60 let Matematicko-fyzikální fakulty UK

V. Valvoda, R. Kužel: Historie skupiny strukturální analýzy na MFF UK, R. Kužel, S. Daniš: Současné vybavení rtg. laboratoře na MFF UK. Jaké jsou možnosti, co můžeme mít, na čem a pro . Instalované strukturální databáze. V. Holý, X. Martí, L. Horák, J. Endres, J. Matějová, M. Barchuk, S. Daniš: Rozptyl rtg. záření na epitaxních nanostrukturách.

R. Kužel, Z. Matěj, T. Brunátová, V. Valeš, S. Daniš: Prášková difrakce na MFF UK (nanoprášky, nanokrystalické vrstvy, nanotrubky, submikrokrystalické objemové materiály). J. Šmilauerová, M. Janeček: Studium fázových transformací v titanových slitinách

L. Sodomka (Liberec): Vzpomínky na české fyziky rtg. záření.

P. Javorský, J. Prchal, J. Prokleška, S. Mašková, M. Kratochvílová, J. Fikáček: Krystalová struktura a magnetismus (magnetická anizotropie, neutronová difrakce, měření za vysokých tlaků, hydridy, krystalové struktury)

M. Pospíšil: Řešení organicko-anorganických hybridních struktur metodami molekulárních simulací. J. Hájek: Využití pozitronové anihilační spektroskopie pro charakterizaci defektů.

Z. Matěj: Možnosti studia velikostí krystalitů a jejich distribuce metodou modelování celého difrakčního záznamu

Exkurze v laboratořích

Organizace: R. Kužel, S. Daniš, V. Holý

290. ROZHOVORY

Ústav experimentální fyziky SAV, 29. 3. 2012

M. Jergel: Aplikácia techník XRR a GISAXS pre štúdium vysokovýkonných rtg. zrkadiel, P. Šutta: Difrakčná analýza vrstiev mc-Si:H pre fotovoltaické aplikácie, M. Čeranský: Poznámka k tvarovému faktoru difrakčných profilov, P. Beran: Materiálový výzkum na neutronovom difraktometru MEREDIT@NPI Rež, M. Petrák: Výzkumný ústav anorganické chemie, a.s. a jeho aktivity v oblasti materiálového výzkumu, K. Saksli: Štruktúra amorfných materiálov hodnotená metódami rtg. a neutrónovej difrakcie, rtg. absorpnej spektroskopie a metódou Reverse Monte Carlo, P. Bezdíka: Jeden den rentgenáče, V. Langer: Zda-li být, či nebyť redaktorem Acta Crystallographica C., V. Jorík: Prášková difrakcia na kokryštáloch, E. Dobroka: Textúra v tenkých vrstvách rastených na monokrystalických podložkách, T. Havlík: Využitie rtg. difrakcie pri materiálovej recyklácii odpadov, N. Ganev: Současné možnosti a omezení aplikace rtg. tenzometrie v materiálovém inženýrství a pr. myslu, L. Smrček: Synchrotronová XRD a XRF analýza římských glazovaných crepov.

Organizace: V. Čeranský, L. Smrček

291. ROZHOVORY

Masarykova univerzita a Vysoké učení technické v Brně, 17. 6. 2013

M. Meduna: Struktura heteroepitaxních mřížkově nepřizpůsobených materiálů, O. Čaha: Strukturální vlastnosti epitaxních vrstev topologických izolátorů - porovnání laboratorních zdrojů s r. známými výkony, T. Roch: Rtg. analýza tenkých vrstev a povlaků v CEFKS KEF FMFI UK v Bratislavě, J. Maršík: Difraktometrie Rigaku, P. Roupčová: Magneticky modifikované nanokrystalické materiály, M. Pasiak: Probing local structure with diffuse scattering, M. Dušek: Malé molekuly, které se nám nepodařilo dobře změřit.

Exkurze v laboratořích.

Organizace: P. Mikulík

292. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR v Praze, 13. 12. 2013

Krystalografie ve fyzice a chemii

J. Kulda: Nano-scale order and dynamics in Pb-based relaxor ferroelectrics, V. Holý: Struktura topologických izolátorů, D. Havlíček: Využití práškové difrakce ke sledování tuhých polutantů v ovzduší, P. Vojtíšek: Stereochemie, M. Koman: Nové měnaté tetramérní komplexy

Organizace: J. Hašek, R. Kužel



P. Vojtíšek



D. Havlíček



V. Holý

Z 292. Rozhovor

293. ROZHOVORY

Technická univerzita v Liberci, Ústav pro nanomateriály
11. 2. 2014

Krystalografie ve strojírenství a materiálovém výzkumu

R. Kužel: Mezinárodní rok krystalografie

Představení Ústavu pro nanomateriály, pokročilé technologie a inovaci TU v Liberci, N. Ganey: Úvodní slovo o Laboratoriu aplikované strukturní rentgenografie, A. Wojtas: Portable and stationary X-ray diffractometers and their applications, S. Skrzypek: Application of the non-destructive X-Ray diffraction methods in characterization of material properties, L. Trško: Využitie röntgenovej difrakcie pri hodnotení povrchov po intenzívnom tryskaní, J. Friemel: Preciosa - firma a její výzkum, L. Zuzánek: Rtg difrakční analýza oxidovaných povrchových vrstev ocelí, O. Šedký: Zbytková napětí po laserovém svařování s práškovým materiálem, Š. Dvořák: Využití rentgenové difrakční analýzy při povrchovém šetření koncových meziků po jejich kalibraci.

Exkurze v laboratořích.

Organizace: N. Ganey

294. ROZHOVORY

Akademie věd ČR, Národní třída, Praha
23. 4. 2014

Od biologie po materiálový výzkum, od proteinů po nanomateriály

Rozhovory k Mezinárodnímu roku krystalografie

R. Kužel: Krystalografie přesahující hranice oborů, S. Daniš: Jak se sněhová vločka k Nobelovým cenám přiblížila aneb pro letošní rok Mezinárodním rokem krystalografie, R. Kužel: Možnosti monokrystalové difrakce, J. Hašek: Nobelovy ceny v krystalografii, E. Tešínská: Mezinárodní krystalografická unie a členství Československa, I. Kraus: Profesorka Adéla Kochanovská, J. Fábry: Geometrické vztahy v některých Santiniho stavbách.

J. Dohnálek, J. Hašek: Proteinová krystalografie, R. Kužel: Možnosti práškové difrakce, Prášková difrakce na Marsu. B. Kratochvíl: Krystalografie a farmaceutický průmysl, M. Kotrlý: Využití práškové difrakce ve forenzní praxi, S. Švarcová: Staří mistři difraktující. Krystalografický výlet za pigmenty českých zemí, L. Smrček: Krystalografie na Limes Romanus, D. Havlíček: Prášková rentgenová difrakce jako užitečný nástroj ke sledování polutantů v ovzduší.



294. Rozhovory - I. Kraus



J. Fábry



M. Kotrlý



J. Dohnálek



B. Kratochvíl

Z. Pala, K. Kolařík: Rentgenová difrakce ve výrobních technologiích, J. Fikáček: Krystalová struktura a magnetické vlastnosti, M. Dušek: Modulované struktury, S. Vratislav: Neutronová difrakce, S. Daniš: Rozptyl rtg záření na nanostrukturách, M. Klementová: Elektronová krystalografie a její využití při charakterizaci nanomateriálů, V. Šubert, J. Bárta: Prášková difrakce v jaderné chemii

Organizace: R. Kužel, J. Hašek

295. ROZHOVORY

Fyzikální ústav AV ČR, Cukrovarnická, Praha
22. 10. 2014

M. Dušek: Úvod, představení oddělení strukturální analýzy, L. Palatinus: Pokroky ve strukturální analýze pomocí elektronové difrakční tomografie, Cinthia Antunes Correa: EDT, PED and dynamical refinement for the structural analysis of Ni_3Si_2 , V. Jarý: Novinky ve výzkumu scintilačních a luminiscenčních materiálů ve Fyzikálním ústavu, K. Knížek: Krystalové a magnetické struktury oxidových materiálů, J. Rohlíček: Inspiroující příklady řešení krystalové struktury polykrystalických látek, J. Plášil: Krystalografie minerálů U^6 , V. Eigner: Programy Jana2006 a Crystals, přednosti a slabiny, J. Hybler: Struktura crosstetu-1M

Exkurze v laboratořích.

Organizace: J. Hybler



296. Rozhovory - P. Šutta

296. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha
12. 12. 2014

Krystalografie ve fyzice a chemii

R. Kužel: Zahájení a vzpomínka na profesora Hanse Wondratschka, estního člena Krystalografické společnosti a spoluautora 1. dílu Mezinárodních krystalografických tabulek, další informace a vyhlášení fotosoutěže, P. Šutta: 10 let výzkumu tenkých vrstev na NTCZ ÚJ v Plzni, M. Jergel: Ex-situ a in-situ diagnostika tenkých vrstev metodou GISAXS (Grazing Incidence Small-Angle X-ray Scattering)

B. Kratochvíl, M. Hušák, J. Šejka, E. Skoepová: Rtg krystalografie ve službách farmacie, J. Hašek: Dostupnost strukturálních databází v České republice (Cambridge database of organic compounds, and macromolecular related databanks PDB, NDB, BMRB, PDBsum, PDBWiki, Proteopedia, models, polymers, drugs, ligands, interfaces, atd.), P. Mikulík: European Synchrotron User Organisation (ESUO) a portál WayForLight.eu,

Organizace: J. Hašek, R. Kužel



M. Jergel



R. erný

P. Skubák

S. Prugove ki

Kolokvium - Struktura 2012

Hotel Centrál, Klatovy

11. - 14. 6. 2013

Výpo etní metody ve strukturní analýze

Hlavní přednášky:

S. Daniš: 100 let rtg difrakce

R. erný: řešení struktur z prášků, V. Petřík: Struktura ve třech i více dimenzích, J. Fiala: Neurčitost výsledků měření, M. Klementová: Strukturní upřesnění z dat přesněji elektronové difrakce, M. Pospíšil, P. Kovář: Výpočetní postupy v molekulární mechanice a dynamice, V. Holý: Softwarové balíky pro výpočet reflektivity a dynamické difrakce, J. Kulda: Difuzní rozptyl neutronů a jeho aplikace pro studium neuspořádanosti v pevných látkách, J. Hašek: Systematická analýza krystalových a molekulárních struktur, P. Skubák: Řešení struktury makromolekul pomocí viacrozměrné statistiky, F. Pavelčík: Semiautomatické hledání ligandů v proteinových strukturách, M. Černanský: Popis difrakčních profilů pomocí matematické statistiky, L. Horák: Simulace difrakčních map.

Krátké přednášky:

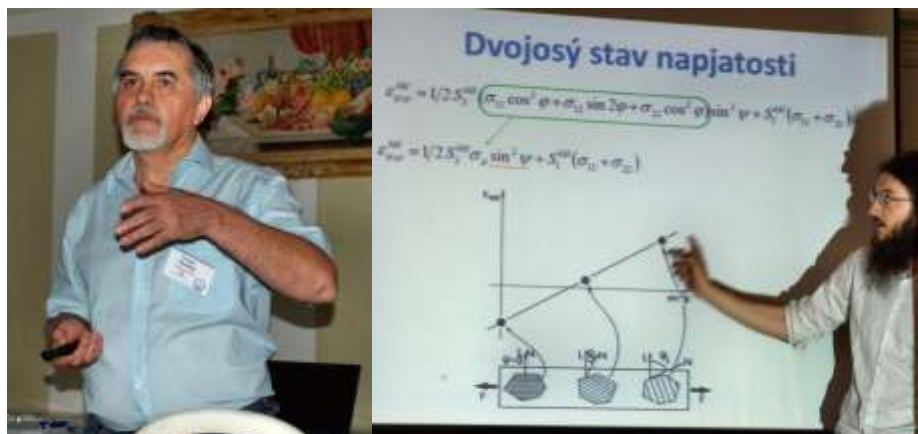
Chemická krystalografie

J. Maixner: Krystalografické studium 10-arylflavínu, J. Kožíšek: Experimentální elektronová struktura koordinovaných zlúčenin, L. Kucková: Analýza krystalové struktury a nábojové hustoty tetrazolu, P. Herich: Syntéza

nových Cu(III) substituovaných dithiolátových komplexů ($\text{CH}_3\text{P}(\text{Ph})_3$) $[\text{Cu}(\text{bdtC}_{12})_2]$, P. Vranec: Struktury nových Pd(II) komplexů s 5,7-halogenderiváty substituovaným 8-hydroxyquinolinom, K. Lacková: Pákrát-koordinované komplexy Cu(II) s trikyanom-etanidom, alebo akým zklamaním možu by výsledky štruktúrnej analýzy, L. Vahovská: Kryštalové štruktúry komplexov Fe(II) a Co(II) s N-donorovými bidentálnymi ligandami, M. Vávra: Kryštalové štruktúry tetrakyanido-platitanov Cu(II).

Materiály, r zné

M. Šlouf: Krystalizace v sendvičových nanokompozitech polymeru PE, PP a POM, F. Laufek: Krystalografické studium ternárních systémů s platinovými kovy, K. Richterová: Studium atomového uspořádání Ni-Mn-Ga pomocí rentgenové difrakce, P. Roupcová: Struktura kvazikrystalických materiálů, M. Kučeráková: Studium textur slitin zirkonia metodu neutronové difrakce, J. Šíha: Fázové transformace zirkonia sledované in-situ rtg difrakcí, J. Kopeček: Slitiny Co-Ni-Al s tvarovou pamětí jako komplexní multiferroika, K. Kolařík: Difrakční studium hloubkové distribuce zbytkových napětí v povrchových vrstvách kuli kovaných bezuhlíkatých ocelí, Z. Matěj: Modelování rozšíření difrakčních profilů vlivem defektu mříže, J. Drahekoupil: Program pro výpočet makroskopických napětí, M. Černík: Použití programů na spresňovanie difrakčných záznamov pri riešení oxidických vrstiev na žiaromateriáloch.



F. Pavelčík

J. Drahekoupil



M. Kolega



Biologické makromolekuly

I. Kutá Smatanová: Porovnání krystalizační schopnosti různých proteinů, P. Skubák: Řešení struktury makromolekul pomocí viacrozmernej štatistiky II, J. Brynda, P. Pacht: Struktura closo a nido boranových klastrových sloučenin v kontextu komplexu s proteinovou molekulou, pokus o tém anorganické inhibitory. Strukturní návrh selektivních inhibitorů pro 5-nukleotidáz, G. Demo: Porovnanie kryštalografickej a NMR štruktúry N-termínálnej domény delta podjednotky RNA-polymerázy, A. Štěpánková: Strukturní a biochemická data enzymu schopného degradace organofosfátu

Přístroje:

S. Prugovečki: Empyrean - news and possibilities, V. Smith: A new ultra-bright X-ray source using liquid-metal jet anode technology, P. Oberthaler: Rigaku přístroje pro SAXS, T. Samtleben: 10 Years Incoatec - Milestones in the Development of Modern X-ray Optics

Kursy

V rámci kolovnia byly uspořádány kursy

Kurs programu FOX (R. Berný) - program primárně pro řešení struktur z prášků (<http://vincefn.net/Fox/>)

Kurs programu Jana (V. Petříček, M. Dušek) - program zaměřený na řešení, zpeřesňování a interpretaci obtížných, zvláště modulovaných struktur (<http://jana.fzu.cz/>)

Kurs programu MSTRUCT (Z. Matěj) - program na zpracování práškových difraktogramů včetně asymetrických skenů (prášky, objemové materiály, zejména tenké vrstvy) se zaměřením na analýzu reálné struktury (velikost krystalitů a jejich distribuce, hustota dislokací, zbytkové napětí, uvážení textury)

Budování protein/NA krystalových struktur s PRCTF programy (F. Pavelčík, J. Václavík)

WWW - <http://www.xray.cz/xray/csca/kol2012/>

Abstrakty příspěvků:

<http://www.xray.cz/ms/bul2012-2.htm>

Počet účastníků: 71



V. Petříček

kvapalina-vzduch, P. Strunz: Přispěvek SANS k vývoji nových materiálů, V. Ryukhtin: Utilization of SANS for investigation of magnetic structures and dynamics

Další přednášky a krátké příspěvky:

L. Smrček: Sprešování struktur z prášku minimalizací energie, M. Bernohorský: Známejší konferencí a kongresů IUCr, J. Novák: Rost a struktura tenkých filmů



L. Smrček

Kolokvium - Struktura 2013

Hotel Panorama, Jeřkovice

9. - 12. 9. 2013

Maloúhlový rozptyl

Kurs experimentálních technik

Hlavní přednášky:

J. Ilavský: USAXS/SAXS/WAXS Instrument, P. Lagner, SAXS - Magnetic resonance - Crystallography. The Magic Triangle in Structural Biology, V. Holý: GISAXS - základy teorie, experimentální uspořádání a některé výsledky, E. Dobroška: GI difrakce: študium hřbkového profilu fázového zloženia, M. Jergel: Aplikácia metódy GISAXS na študium samousporiadania nano astíc na rozhraní



M. Dopita



J. Kopeček

organických polovodičů: GISAXS studie in-situ v reálném čase, V. Ryukhtin: SANS experiment on superplastic ceramic, V. Holý: Rtg studium nukleace a růstu precipitátů omega fáze v titanových slitinách, M. Meduna: Skenovací rtg submikronová difrakce na 3D heteroepitaxních mikrokrystalech, Z. Matěj: Difraktometr Rigaku RAPID: orientování a indexování velkých kompaktních krystalů v geometrii na odraz, M. Šeranský: Určování velikosti krystalitů a mikronapětí z profilů difrakčních linií, P. Roupčová: Velikost částic a morfologie práškových materiálů, M. Dopita: Rtg rozptyl na strukturách turbostratického uhlíku, J. Filip: Využití vysokoteplotní RTG difrakce pro přípravu a charakterizaci kompozitních (nano)materiálů obsahujících nanočástice elementárního železa, A. Zorkovská: Štruktúrna charakterizácia mechno chemicky syntetizovaných polovodičových PbS nanokryštálov, J. Dražokoupil: Využití výpočetních metod při studiu struktury, F. Laufek: Krystalografické studium ternárního systému Pd-Ag-Te, J. Maixner: Krystalová struktura hydrogenfosforenanu draselného trihydrátu K_2HPO_4 z laboratorních práškových dat, D. Šimek: Využití rtg difrakce k charakterizaci pevnosti feriticko-perlitických ocelí, J. Kopeček: Strukturální vývoj v systému CoNiAl F-SMA, Z. Pala: Struktura, mikrostruktura a zbytková napětí v boridovaných vrstvách ocelí.

P. Oberta: SAXS portfolio @ Rigaku, S. Prugovec: Extending the SAXS capabilities of the multi-purpose Empyrean X-ray diffraction platform.

10. pohlídka studentských prací z oblasti krystalografie a strukturní analýzy

Sekce Materiály a fyzika:

J. Ržička: Studium manganem dopovaných topologických izolátorů Bi_2Se_3 a Bi_2Te_3 pomocí rtg absorpční spektroskopie, J. Endres: Kinetické Monte Carlo simulace růstu multivrstev kvantových teček Ge v amorfni matrici, J. Rozbořil: Strukturální vlastnosti epitaxních Ge mikrokrystalů na Si, V. Valeš: Nanočástice Fe_2O_3/TiO_2 - komplexní strukturální studium, T. Brunátová: Studium struktury a teplotní stability titanátových nanotrubeček, M. Kučeráková: Studium textur slitin zirkonia neutronovou a rentgenovou difrakcí, J. Špek: Analýza stavu zbytkové napjatosti texturovaných materiálů, K. Richterová: Výzkum struktury Heuslerových sloučenin, J. Bárta: Význam práškové difrakce při přípravě oxidových nanomateriálů, I. Vtvička: Creep textures of water-water nuclear power reactors cladding tubes made of Zr1Nb alloy examined by neutron diffraction supplemented by metallographic research of hydrides.

Ocenění v této kategorii získali: V. Valeš, J. Ržička, J. Rozbořil.

Sekce Biokrystalografie:

J. Štránský: Struktura a funkce bakteriálních nukleáz, T. Holubeva: Isolation and crystallization of PSII from higher plants with different content of detergent, I. Iermak: Crystallization of the members of multistep signalling system from *Arabidopsis thaliana*, O. Degtjarik: Structural characterization of the members of the multistep signaling system from *A. thaliana*, K. Tratsiak: Crystal structure of haloalkane dehalogenase DpcA from psychrophilic *Psychrobacter cryohalolentis* K5, E. Tutubalina: Using Ionic Liquids in Protein Crystallization, J. Písková: Towards Structures Of Antibodies, Receptors and Transcription Factors, G. Demo: Krystalizace a rtg analýza beta-D-mannosidázy z *Aspergillus Niger*.

Ocenění získali: J. Písková, G. Demo a O. Degtjarik.



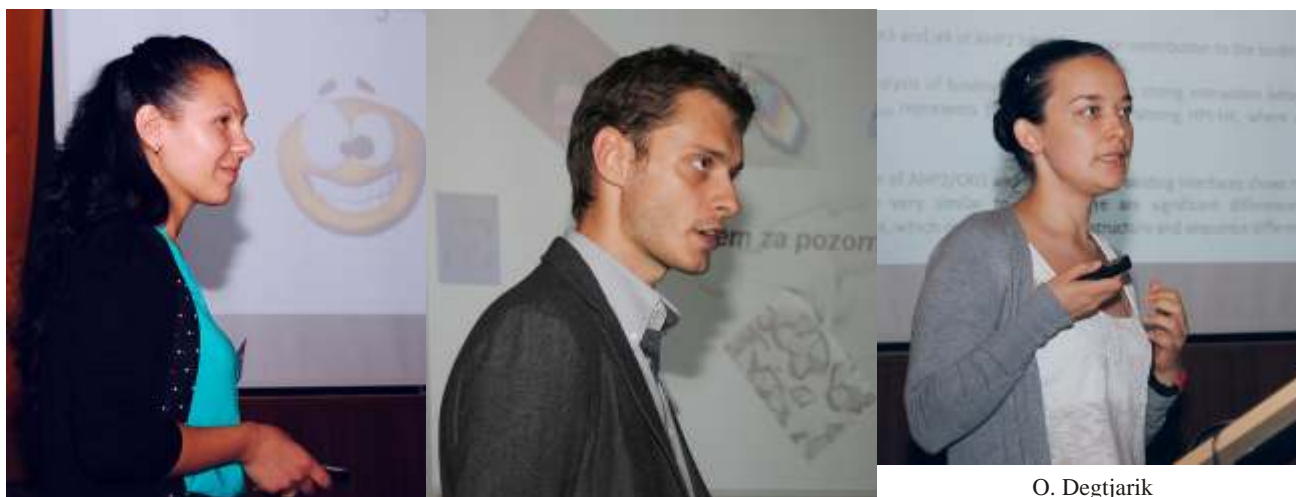
K. Richterová



I. Vtvička



J. Špek



K. Tratsiak

G. Demo

O. Degtjarik

Kurs experimentálních technik se zaměřením na biokrytalografii

V. Petříček: Principy difrakčních metod, zpracování dat, korekce, Symetrie a určení prostorové grupy, Zpracování struktur, dvojatní, modulace

J. Kulda: Rozptyl neutronu: základy techniky a využití ve strukturální analýze,

J. Brynda: Proteinová krystalografie - indexace, výpočty intenzity měřené plošnými detektory, určení struktury, K. Fejfarová: Zdroje rtg záření, T. Skálová: Detektory užívané přímo pro měření struktur, P. Pezárková: Analysis and validation of protein X-ray structures, T. Kovač: Makromolekulární stanice na synchrotronu BESSY a XFEL, B. Schneider: Bioinformatická analýza krystalových komplexu protein-DNA, J. Brynda: Selektivní inhibitory 5'-nukleotidáz, I. Kutá Smatanová: Krystalografická studia vybraných halogenalkandehalogenas, R. Chaloupková: Modifikace aktivity, substrátové specifity a stability halogenalkandehalogenáz inženýrstvím zanořených halogenid-vazebných míst, J. Brynda: Proteinová krystalografie - indexace, výpočty intenzity měřené plošnými detektory, určení struktury.

Kolokvium - Struktura 2014

Hotel U kata, Kutná Hora

9. - 12. 6. 2014

Mezinárodní rok krystalografie

Historie:

I. Kraus: Profesorka Adéla Kochanovská, video - Kryštály a štruktúrna analýza (1979) (S. Šurouvi, D. Mikloš), J. Loub, M. Rieder: Poátky rtg difrakce na Albertov

Hlavní přednášky:

M. Kotrlý: Fázová analýza ve forenzní oblasti, J. Hašek: Pokroky proteinové krystalografie, Jan Dohnálek: Krystalografie enzymu, L. Palatinus: Upravení krystalových struktur z dat elektronové difrakční tomografie, B. Rus: ELI - unikátní laserové centrum v ČR, P. Oberta: Využití difrakce na dokonalých krystalech ke zkracování FEL pulzu a měření jejich délky, M. Černík: Röntgenová difrakční analýza keramických materiálů používaných v U. S. Steel Košice, M. Dušek: Před komplikovanými látkami není úniku (ukázky podivuhodných struktur), J. Moncol: Neporiadky (disorders): problémy alebo nová informácia v chemickej kryštalografii?, P. Štápníková: Strukturální pekvapení v organokovové chemii, M. Hušák: Limitní hranice



M. Černanský

M. Rieder

J. Loub



I. Iermak



M. Barchuk



M. Šlouf

složitosti při řešení struktury z práškových difrakčních dat, J. Gertenbach: Powder diffraction in everyday life.

Krátké příspěvky:

F. Laufek: Příspěvek ke krystalografii Ag-Pd chalcogenidu, R. Skála: Studium experimentálně dynamicky stlačeného dolomitu pomocí TEM a rtg práškové difrakce, M. Pospíšil: Molekulární simulace vrstevnatých struktur, M. Beránský: Určování amorfního podílu v částecích krystalických materiálech, G. Demo: Proteinové struktury novo-odhalených bakteriálních lektinových rodů, I. Iermak: Structural characterization of glyceraldehyde dehydrogenase from *Thermoplasma acidophilum*, M. Klementová: Elektronová difrakční tomografie MgZn precipitátu v Mg matici, M. Šlouf: Využití Fourierovy transformace v elektronové mikroskopii, M. Dopita: Mikrostruktura a teplotní vývoj turbostratického uhlíku studované různými analytickými metodami, J. Šapek: Vývoj dvojatomní vlnové funkce v závislosti na směru namáhání, G. Farkas: Study of magnesium composites by neutron diffraction method, J. Kopeček: Slitiny s tvarovou pamětí připravené různými metodami, Z. Matěj: Extrakce profilových parametrů jednotlivých difrakčních linií pomocí programu MSTRUCT - aplikace na materiály s anizotropním rozšířením, J. Šapek: Uživatelské programy pro difrakční experimenty, S. Daniš: Určování tloušťky tenkých vrstev pomocí XRD, XRF a XRR, J. Drahoukoupil: Měření mřížových parametrů monokrystalu a tenkých vrstev, P. Roupčová: Teplotní stabilita mleté slitiny Fe-Al, M. Barchuk: Investigation of microstructure defects in HTVPE grown polar GaN layers, L. Horák: Strukturní studium SrIrO₃, A. Zorkovská: Polymorfismus siričanu arseničnanu - potenciální protirakovinné efekty, A. Kallistová: Závislost mikrostruktury dentálního hydroxylapatitu na délce vývoje zubu, A. Šajka, Pavla Šapková: Rtg difrakční studium nanovláknitých polymerních materiálů, T. Brunátová: Studium vysokoteplotní transformace titanátových nanotrubic.



M. Pospíšil, M. Dopita

Komerční příspěvky

M. Winter (Agilent): Advances in X-ray crystallography, J. Gertenbach (Panalytical): XRD news from Panalytical, A. Beerlink (Incoatec): Upgrading Home-Lab X-ray Diffractometers with Incoatec's Unique Microfocus Source, P. Oberta (Rigaku): Rigaku EUV/RTG optika a detektory, B. Míček (Měřicí technika Morava): Detektor LynxEye XE a další novinky od Bruker AXS.



J. Dohnálek, B. Schneider, na shromáždění len SSB.



Bruker na XII. Discussions - V. Smith, B. Mí



J. Vondrášek

Ve er na
XI.Discussions

Krystalografická společnost se podílela i na přípravě tradičních **Discussions in Structural Molecular Biology**, pořádaných v Nových Hradech, nyní také jako výroní konference české společnosti pro strukturní biologii.

www.structbio.org

XI Discussions in Structural Molecular Biology

Akademické a univerzitní centrum Nové Hradý
14.–16. 3. 2013

Abstrakty p ísp vk :

<http://www.xray.cz/setkani/abst2013/abstracts.htm> (html)

<http://www.xray.cz/ms/bul2013-1.htm> (pdf)

Po et ú astník : 107

Po et poster : 37

XII Discussions in Structural Molecular Biology

Akademické a univerzitní centrum Nové Hradý
13.–15. 3. 2014

Abstrakty p ísp vk :

<http://www.xray.cz/setkani/abst2014/abstracts.htm> (html)

<http://www.xray.cz/ms/bul2014-1.htm> (pdf)

Po et ú astník : 112

Po et poster : 45

1. ro ník FEBS-INSTRUCT praktického krystaliza ního kurzu ve st ední Evrop s názvem ‘Advanced Methods in Macromolecular Crystallization VI’

Akademické a univerzitní centrum Nové Hradý, 20. 6.- 27. 6. 2014

Na p edchozích p t úsp šných ro ník FEBS pokro ilých krystaliza ních kurz konaných v letech 2004, 2006, 2008, 2010 a 2012 navázal první ro ník FEBS-INSTRUCT praktického krystaliza ního kurzu po ádaného poslední ervnový týden 2014. Na kurz p ijalo pozvání 24 p edních sv tových odborník z oblasti proteinové krystalografie jako nap . Prof. Bernhard Rupp z Hofkristallamt z Vista (USA), Dr. Terese Berfors z Uppsala University (Švédsko), Prof. Christian Betzel z Univ.-klinikum Hamburg (N mecko) a další. Akci, která byla po ádaná pod záštitou FEBS (Federation of European Biochemical Societies) a INSTRUCT, sponzorovalo 7 zahrani ních a 1 eská firma a také eská a Slovenská Krystalografická společnost. Na základ požadovaných kritérií bylo na kurz vybráno 29 student z ech a z ostatních evropských zemí. V dopoledních cyklech p ednášek se studenti seznámili s metodami izolace, purifikace a krystalizace protein . Obezámili se nejen se standardními postupy, ale také s nejnov jšími trendy. V odpoledních hodinách si v rámci praktické výuky vyzkoušeli vše, co se dozv d li na p ednáškách. Praktická cvi ení se konala v míst kurzu v Laborato i biomolekulární krystalogeneze a krystalografie.



V rámci jednotýdenního pobytu byl zajištěn kromě vdeckého programu také kulturní-společenský program, například návštěva starého hradu v Nových Hradech. Na závěr kurzu byla studenty vyhodnocena jeho odborná a společenská úroveň formou dotazníku a lze konstatovat, že účastníci byli s kurzem maximálně spokojeni. Kurz byl společně se Školou proteinyvé krystalografie označen za jeden z nejlépe organizovaných krystalizačních kurzů na světě. Veškeré informace o krystalizačních kurzech pořízených na Nových Hradech jsou uveřejněny na internetové adrese <http://febs.img.cas.cz>

Počet účastníků: 29
Počet přednášejících: 26

Abstrakty příspěvků byly otištěny v *Materials Structure*, vol. 21, no. 2a (2014).

Organizátoři:

Ivana Kutá Smatanová, Pavlína Jeřábková, Juan Manuel García-Ruiz

Ivana Kutá Smatanová

Odborná skupina chemie a fyziky tuhých látek

Development of Material Science i Research and Education

Další z řady seminářů - 24. seminář se uskutečnil v Lednici od 8. do 12. 9. Pořadatelem byla Odborná skupina chemie a fyziky tuhých látek spolupracující s komitétem (viz níže, místopředseda komitétu) a Společnost pro röntgenový krystalograf. Seminář byl zahájen přednáškou „100 years of crystallography“. Odborná skupina se zasloužila také o publikaci článku „Medzinárodný rok kryštalografie“ v časopise *ChemZi* (Slovenský časopis o chémii pre chemické vzdelávanie, výskum a priemysel), díl 10, číslo 1 (2014 (jún)) a „100 rokov modernej kryštalografie“ v časopise *QUARK* - 10/2014. Zároveň v Národnom centre pre popularizáciu vedy a techniky v spoločnosti na toto téma odeznala přednáška dne 30. 10.

Vdecká rada Krystalografické společnosti 2010-2013

V tomto období pracovala rada ve složení: Hana Brusová, Jiří Brynda, Jaroslav Fiala, Nikolaj Ganev, Jindřich Hašek, Jaromír Hrdý, Jiří Hybler, Jiří Kulda, Ivana Kutá Smatanová, Radomír Kužel, Petr Mikulík, Bohdan Schneider, Zbyněk Šourek.