



STRUKTURA 2015 - PROGRAMME

Monday, June 22

11:00 13:30 Registration

13:45 Struktura 2015 - Opening

14:00 16:00 Session I - **Structural Databases**

J. Hašek, B. Schneider

L1 140

Jindřich Hašek

(Biotechnologický ústav AV ČR, Praha)

50 let Cambridgské strukturní databáze CSD

50 years of Cambridge Structural Database - CSD

L2

Bohdan Schneider

(Biotechnologický ústav AV ČR, Praha)

45 let Proteinové strukturní databanky PDB

45 years of Protein Structure Databank

L3

Ján Moncol

(Fakulta chemickej a potravinárskej technologickej STU, Bratislava)

Využitie CSD na slovenských vysokých školách

Use of CSD in Slovak Universities

16:00 *Coffee break*

16:30 18:50 **Course on groups in crystallography**

small hall A

R. Kužel, E. Dobročka

19:00 Dinner

20:00 21.30 **Course on groups in crystallography**

small hall A

R. Kužel, V. Petříček

Tuesday, June 23

7:30 8:30 Breakfast

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

chair: *J. Hašek*

8:30

L4 142

Michal Dušek

(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)

System pro správu vzorku pomocí internetu: cesta od jednoduché tabulky k monstři

System for sample administration with the aid of Internet: a way from simple table to monster

9:10

L5 145

Jiří Brynda

(Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha)

Upřesňování proteinových struktur na vysokém rozlišení, "lesk a bída" strukturní analýzy biomolekul

High-resolution protein structure refinement - glory and misery of structure analysis of biomolecules

9:35

L6 145

Michal Babiak

(CEITEC - Středoevropský technologický institut, MU Brno)

Služby centrální laboratore RTG difrakce v CEITEC-MU v Brně

Services of central laboratories of CEITEC-MU Brno

L7

127

Tomáš Klumpler

(CEITEC - Středoevropský technologický institut, MU Brno)

BioSAXS CEITEC-MU v Brně

BioSAXS CEITEC-MU in Brno

10:10 *Coffee break*

**11. studentská přehlídka**

student symposium

10:30 12:30 **Session SI**chair: *L. Urbániková, B. Schneider*

10:30	S1	146	Eliška Skořepová (VŠCHT v Praze) Rtg a NMR studia protonovaného stavu farmaceutických amidů X-ray and NMR studies of protonated state of pharmaceutical amides
10:50	S2	147	Veronika Sládková (VŠCHT v Praze) Farmaceutické kokrystaly a jejich aplikace Pharmaceutical cocrystals and their applications
11:10	S3	148	Iuliia Iermak (Přírodovědecká fakulta JČU v Českých Budějovicích) Structural characterization of glyceraldehyde dehydrogenase from <i>Thermoplasma acidophilum</i>
11:30	S4	149	Daria Malakhova (Přírodovědecká fakulta JČU v Českých Budějovicích) Crystallization of novel haloalkane dehalogenase DgaA isolated from <i>Glaciecola agarilytica</i> NO2
11:50	S5	150	Katsiaryna Tratsiak (Přírodovědecká fakulta JČU v Českých Budějovicích) Structural characterization of the representative of the alpha/beta-hydrolase superfamily from <i>Marinobacter</i> sp. ELB17
12:10	S6	150	Daniela Jamrichová (Fakulta přírodních věd, Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnavě) Acetylésteráza CE16 z huby <i>Hypocrea jecorina</i> The study of CE16 acetyl esterase from the fungus <i>Hypocrea jecorina</i>

12:30 Lunch

13:50 15:10 **Session SII**chair: *M. Jergel, P. Bezdička*

13:50	S7	152	Milan Pšenička (Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha) Molekulární simulace interakcí nanočástic CdS s montmorillonitem Molecular simulations of interactions between CdS nanoparticles and montmorillonite
14:10	S8	153	Jakub Rozbořil (Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně) Rtg difrakční studium relaxace napětí v mikrokrystalech Ge Strain relaxation in Ge microcrystals studied by X-ray diffraction
14:30	S9	154	Dorota Kašćáková (Ústav anorganické chemie AV ČR, Řež) Příprava a charakterizácia nanokompozitov Fe ₂ O ₃ /SiO ₂ substituovaných skandiom Preparation and Characterization of Iron (III) Oxide Nanocomposites Substituted with Scandium
14:50	S10	154	Miroslav Soroka (Ústav anorganické chemie AV ČR, Řež) Příprava orientovaných vrstev Co ₃ O ₄ rozkladem Na _x CoO ₂ Preparation of oriented Co ₃ O ₄ films by decomposition of Na _x CoO ₂
15:10 <i>Coffee break</i>			
15:25 17:05 Session SIII chair: <i>M. Černík, D. Šimek</i>			
15:25	S11	155	Jiří Čapek (Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha) Určování zbytkového napětí v duplexní oceli během termomechanického zpracování Residual stress determination in duplex steel during thermo-mechanical treatment
15:45	S12	156	Monika Kučeráková (Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha) Studium textury metagabro mylonitu pomocí neutronové difrakce Study of texture of metagabro mylonite by neutron diffraction



16:05 S13 Martin Dudr (<i>Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha</i>) Srovnání struktury teplotně a tahově indukovaného martenzitu v nitinolu In-situ XRD Analysis of Nitinol under Tensile Stress	157	18:20 S19 Jana Šmilauerová (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Studium růstu částic fáze omega ve slitinách titanu pomocí rentgenové difrakce Study of particle growth in titanium alloys using X-ray diffraction	162
16:25 S14 Petr Veřtát (<i>Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha</i>) Stanovení koeficientu teplotní roztažnosti skandátu vzácných zemin pomocí rentgenové difrakce Determination of the thermal expansion coefficients of rare-earth scandates by X-ray diffraction	158	19:00 Dinner	
16:45 S15 Josef Kašlík (<i>Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci</i>) Vysokoteplotní RTG prášková difrakce jako nástroj pro monitorování termicky indukovaných transformací -Fe ₂ O ₃ v atmosféře různých plynů High temperature X-ray powder diffraction as a tool for monitoring of thermally induced transformation of β-Fe ₂ O ₃ in various atmospheres	159	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	
<hr/>			
Wednesday, June 24			
		7:30 8:30 Breakfast	
		8:30 9:20 Session III	chair: <i>S. Daniš, P. Bezdička</i>
<hr/>			
17:05 <i>Coffee break</i>		8:30 L8 Marek Kotrlý (<i>Kriminalistický ústav, Praha</i>) Zajímavé případy z praxe Kriminalistického ústavu Interesting examples from the practise of Institute of Criminalistics	164
17:20 18:50 Session SIV chair: <i>E. Dobročka, J. Kopeček</i>		9:05 L9 Jan Drahoukoupil (<i>Fyzikální ústav AV ČR Praha</i>) Rentgenová difrakce v praxi X-ray diffraction in practise	164
<hr/>			
17:20 S16 Petr Cejpek (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Studium struktury Heuslerových slitin pomocí rentgenových metod XRD study of structure of Heusler alloys	159	9:25 L10 Peter Oberta (<i>Rigaku Innovative Technologie Europe</i>) Nový difraktometr Rigaku - SmartLab3 New Rigaku diffractometer - SmartLab3	
17:40 S17 Cinthia Antunes Correa (<i>Fyzikální ústav AV ČR, Praha</i>) Accuracy of structure analysis of single nanocrystals by PED	160	9:45 L11 News from Panalytical	
18:00 S18 Tereza Brunátová (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Studium teplotní stability titanátových nanotrubeček do 800 °C Study of temperature stability of titanate nanotubes up to 800 °C	161		
		10:15 <i>Coffee break</i>	

10:40 12:45 **Session IV**chair: *S. Daniš, R. Kužel*10:40
L12 137**Matej Jergel***(Fyzikálny ústav SAV, Bratislava)*

Kryštalová optika pre tvarovanie rtg zväzku

Crystal X-ray optics for metrology and imaging

11:05
L13 166**Zdeněk Matěj***(MAX IV, Univerzita v Lundu, Švédsko)*

Integrace dat z 2D detektoru při skenovacím práškovém difrakčním experimentu

Integration of 2D detector data in scanning powder diffraction experiment

11:30
L14 133**Martina Hřibová***(Ústav výrobního inženýrství, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně)*

Vliv fyzikálních faktorů na fázovou strukturu isotaktického polybutenu - 1

The effect of some physical factors on the phase structure of isotactic polybutene - 1

11:50
L15a**Petr Mikulík***(Ústav fyziky kondenzovaných látek PŘF MU Brno)*

European Synchrotron User Organisation (ESUO) a portál WayForLight.eu

12:05
L15b 168**Radomír Kužel***(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*

Mezinárodní rok krystalografie a aktivity Mezinárodní krystalografické unie - IUCr

International Year of Crystallography - IYCr

International Union of Crystallography – IUCr

12:30 Lunch

13:40 15:20 **Course on groups in crystallography***small hall A**V. Petříček*15:30 19:00 **Session Va**chair: *M. Dopita, J. Drahekoupil*15:30
L16 171**Edmund Dobročka***(Elektrotechnický ústav SAV Bratislava)*

Meranie zbytkových napätí v silne orientovaných vrstvách

Measuring of residual stresses in strongly textured thin films

15:50
L17 172**Martin Černík***(U.S.Steel Košice)*

Röntgenová difrakčná analýza uhlia a koksu

X-ray Diffraction Analysis of Coal

16:10
L18 174**Jaromír Kopeček***(Fyzikální ústav AVČR Praha)*

Slitiny s tvarovou pamětí studované pomocí EBSD

Shape memory alloys investigated by EBSD method

16:30
L19 175**Daniel Šimek***(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)*

Mikrostruktura tažené perlitické oceli a její obraz v rtg. difrakci

Microstructure of drawn pearlitic steel and its image in XRD

16:50
L20 175**Marian Čerňanský***(Fyzikální ústav AVČR, Praha)*

Laserové opracování materiálů

Laser treatment of materials

17:10 Break

17:30
L21 176**Lukáš Horák***(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*

Studium (magneto-)strukturního přechodu v tenkých vrstvách FeRh pomocí XRD

X-ray diffraction study of the (magneto-)structural transition in FeRh thin layers

17:50
L22 177**Tomáš Roch***(Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK v Bratislave)*

Štruktúrna charakterizácia heteroštruktúr plynových senzorov na báze kovových oxidov

Structural characterization of metal oxide based gas sensor heterostructures



18:10 L23	178	L29 17:35	185
Robert Uhrecký (Ústav anorganické chemie AV ČR, Řež) Orientované vrstvy SrAl ₁₂ O ₁₉ připravené metodou CSD Oriented SrAl ₁₂ O ₁₉ thin films by chemical solution deposition method		Barbora Vidová (Ústav molekulární biologie SAV Bratislava) Aktinofágové endolýziny: bioinformatická analýza domén a protein-substrát interakcí Actinophage endolysins: bioinformatic analysis of domains and their interactions with substrate	
18:30 L24	179	18:00 L30	186
Peter Vranec (U.S.Steel Košice) Stanovenie fázového zloženia aglomerátov metódou röntgenovej difrakcie		Radka Chaloupková (Přírodovědecká fakulta MU, Brno) Vyladění přístupového tunelu enzymu Fine-tuning of enzyme access tunnel for minimisation of stability-function trade off	
15:30 19:00 Session Vb chair: P. Vojtíšek, J. Brynda		18:25 L31	187
L25 15:30	181	Tatyana Prudnikova (Přírodovědecká fakulta JČU v Českých Budějovicích) Structural characterization of haloalkane dehalogenases	
Ján Moncol (Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Bratislava) Samosporiadanie med'natých karboxylátov do supramolekulových dimérov a supramolekulových sietí prostredníctvom vodíkových väzieb A self-assembly of copper(II) carboxylate through H-bonds into supramolecular structure and supramolecular networks		19:00 Assembly of the CSCA members 20:00 Dinner	
L26 16:00	182	Thursday, June 25	
Erik Rakovský (Přírodovědecká fakulta UK Bratislava) Funkcionalizácia polyoxometalátov komplexami prechodných kovov Funkcionalizácia polyoxometalátov komplexami prechodných kovov		7:30 8:30 Breakfast	
L27 16:20	184	8:30 10:20 Session VI chair: M. Dušek, J. Hybler	
Bohdan Schneider (Biotechnologický ústav AVČR, Praha) "Jemná struktúra DNA" duplexu "Fine structure" of double helical DNA		8:30 L32	188
16:45 Break		František Laufek (Česká geologická služba, Praha) Strukturální typy a anorganická strukturální databáze Concept of structural types in the Inorganic Crystal Structure Database (ICSD)	
L28 17:10	184	9:10 L33	189
Eubica Urbániková (Ústav molekulárnej biológie SAV Bratislava) Glukoamylázy zo <i>Saccharomycopsis fibuligera</i> - štruktúra a stabilita Glucoamylases from <i>Saccharomycopsis fibuligera</i> - structure and stability		Radomír Kužel (Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha) Možnosti užití nové verze databáze práškových difrakčních dat - PDF-4+, volně dostupné strukturální databáze Use of Powder Diffraction File – PDF4+, open structure databases	



9:35 L34 Jan Rohlíček (Fyzikální ústav AV ČR Praha) Řešení struktur z laboratorních práškových difrakčních dat - trendy, možnosti, příklady Structure solution from laboratory powder diffraction data - trends, possibilities, examples	192	11:10 L36 Mojmír Meduňa (Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Brno) Rekonstrukce tvaru mikrokristalu pomocí rtg nanodifrakce na 3D multivrstvách Reconstruction of crystal shapes by X-ray nanodiffraction from 3D multiple quantum wells	194
10:20 <i>Coffee break</i>		11:35 L37 Miroslav Šlouf (Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha) Využití Fourierovy transformace při analýze Application of Fourier Transform to Image Analysis of Micrographs II	196
10:40 12:30 Session VII chair: Z. Šourek, P. Mikulík			
10:40 L35 Jiří Novák (Pokročilé nanotechnologie a mikrotechnologie, CEITEC MU Brno) Rozmanitost a systematika struktur binárních směsí organických polovodičů Diversity and systematics of structures of binary mixtures of organic semiconductors	193	11:55 L38 Milan Dopita (Bergakademie Technical University Freiberg) Rtg rozptyl na silně porušených uhlíkatých materiálech X-ray scattering on highly perturbed carbon nanomaterials	197
		12.30 Lunch	
		13:30 15:30 Course on groups in crystallography <i>small hall</i> <i>V. Petříček, R. Kužel</i>	

Contents

Biological Small Angle X-Ray Scattering at CEITEC-MU	T. Klumpler, T. Gerguri, O. Jasnovidova, L. Krejčí, K. Kubiček, D. Němeček, V. Sedláček, R. Štefl	127
The effect of some physical factors on the phase structure of isotactic polybutene-1	M. Hřibová, F. Rybníkář, J. Jakubíček	133
Crystal X-ray optics for metrology and imaging	M. Jergel, K. Végső, P. Šiffalovič, Y. Halahovets, D. Korytár, Z. Zápražný, P. Vagovič	137
Abstracts from Struktura 2015		
Monday, June 22, Session I		140
Tuesday, June 23, morning, Session II		142
Tuesday, June 23, Student symposium I		146
Tuesday, June 23, Student symposium II		152
Tuesday, June 23, Student symposium III		155
Tuesday, June 23, Student symposium IV		159
Wednesday, June 24, morning, Session III		164
Wednesday, June 24, morning, Session IV		166
Wednesday, June 24, afternoon, Session Va		171
Wednesday, June 24, afternoon, Session Vb		181
Thursday, June 25, Session VI		188
Thursday, June 25, Session VII		193
Programme		200
Author index		206