



STRUKTURA 2016 - PROGRAMME

Monday, September 12

11:00 13:30 Registration

14:00 Struktura 2016 - Opening

14:00 16:00 Session I

**25 let Krystalografické společnosti
Vzpomínka na některé členy KS
25 years of the CSCA**

L1

František Laufek

(Česká geologická služba, Praha)

Krystalografie před Laueho objevem
Crystallography before Laue discovery

339

L2

Václav Petříček

(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)

Řešení magnetických struktur
Solution of magnetic structures

340

16:00 *Coffee break*

16:30 18:45 Session II

B. Schneider

L3

Jindřich Hašek

(BIOCEV, Biotechnologický ústav AV ČR, Vestec)

Dynamická teorie krystalizace proteinů jako nástroje
kontroly architektury proteinových krystalů

Dynamic Theory of Protein Crystallization as a Tool for a Control
of Protein Crystal Architecture

341

L4

Eubica Urbániková

(Ústav molekulárnej biológie SAV Bratislava)

Vplyv mutácií na štruktúru a vlastnosti proteínov

Influence of mutations on the protein structure and properties

342

L5

Jiří Nováček

(CEITEC, Masarykova univerzita Brno)

Cryo-TEM - Structure and genome delivery of polyvalent
staphylococcal bacteriophage phi812 determined by
cryo-electron microscopy

343

SL1

Jiří Brynda

(Ústav molekulárnej biológie SAV Bratislava)

Carborane and metallacarborane inhibitors of Carbonic
Anhydrase IX, promising compounds for therapy

Radomír Kužel

(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)

Novinky z IUCr

IUCr news

343

19:00 Dinner

Tuesday, September 13

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:30 Session III

chair: *J. Hašek*

8:30

L6

Pavel Srb

(Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha)

NMR a rtg difrakce již nejsou nepřátelé

NMR and X-rays are not enemies anymore

344

9:20

L7

Jakub Čížek

(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)

Pozitronová anihilační spektroskopie

Positron annihilation spectroscopy

344

10:10 *Coffee break*

10:40 12:30

chair: *P. Mikulík*

10:40

L8

Adriana Lančok

(Ústav anorganické chemie AV ČR, Řež)

Netradiční aplikace Mössbauerovy spektroskopie

Non-traditional Applications of the Mössbauer Spectroscopy

345



| | | | |
|---|------------------|--|-----|
| L9 | 346 | 17:00 | |
| Zdeněk Matěj | | L13 | 353 |
| (MAX IV Laboratory, Lund University, Lund, Sweden) | | Petr Mikulík | |
| Nástroje pro studium nanomateriálů metodou párové distribuční funkce | | (Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Brno) | |
| Methods and tools for analysis of nanomaterials by means of atomic pair distribution function | | Rentgenové zobrazovací metody | |
| | | X-ray imaging methods | |
| SL2 | 348 | 17:45 | |
| Petr Ryšánek | | L14 | 354 |
| (Přírodovědecká fakulta UJEP, Ústí nad Labem) | | Marek Kotrlý | |
| Strukturální charakterizace polymerních nanovlákných textilií | | (Kriminalistický ústav Praha) | |
| Structural analysis of nanofibers prepared by NANOSPIDER technology | | Zajímavosti z fázové analýzy ve forenzní praxi | |
| | | Curiosities from phase analysis in forensic science | |
| SL3 | 349 | 18:30 | |
| Iryna Hren | | SL4 | 355 |
| (Přírodovědecká fakulta UJEP, Ústí nad Labem) | | Jan Drahokoupil | |
| Interakce nylonu 6 s antibakteriálními molekulami | | (Fakulta strojní ČVUT, Praha) | |
| Interaction of nylon 6 with antibacterial molecules | | Charakterizace vlivu přípravy na mikrostrukturu titanových materiálů pro iontovou implantaci dusíku | |
| | | Characterization of influence of preparation on titanium materials for ion implantation | |
| <hr/> | | | |
| 12:30 Lunch | | | |
| 14:00 18:50 Session IV | | 19:00 Dinner | |
| | chair: Z. Šourek | | |
| <hr/> | | | |
| 14:00 | | 20:15 Meeting of the scientific board of Czech and Slovak Crystallographic Association and IUCr Regional Committee of the Czech and Slovak Crystallographers | |
| L10 | 351 | 20:00 Meeting of young crystallographers | |
| Anna Macková | | | |
| (Ústav jaderné fyziky AV ČR, Řež) | | | |
| Energetické iontové svazky pro charakterizaci složení a struktury krystalických materiálů pro optiku a fotoniku | | | |
| Energetic ion beams for compositional and structural study of crystalline materials for optics and photonics | | | |
| 15:00 | | | |
| L11 | 352 | | |
| Vladimír Havránek | | | |
| (Ústav jaderné fyziky AV ČR, Řež) | | | |
| Iontová mikrosonda - Analýzy a modifikace materiálů energetickými ionty | | | |
| Ion microprobe – Analysis and modification of materials with energetic ions | | | |
| <hr/> | | | |
| 16:00 <i>Coffee break</i> | | | |
| <hr/> | | | |
| 16:30 18:50 | | | |
| 16:30 | | | |
| L12 | | | |
| Jakub Čížek | 353 | | |
| (Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha) | | | |
| Atomový tomograf | | | |
| 3D atome probe | | | |

Wednesday, September 15

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:10 **Session V**

chair: J. Hybler

8:30

L15 356 || **Jiří Kulda** | | | |
| (ILL Grenoble, France) | | | |
| Rozptyl neutronů a jeho komplementarita s rtg difrakcí | | | |
| Neutron scattering and its complementarity with X-ray techniques | | | |

9:10

L16 356 || **Michal Hušák** | | | |
| (VŠCHT Praha) | | | |
| Verifikace určení struktury molekulárních krystalů pomocí výpočtů QM-DFT | | | |
| Validation of powder diffraction based structure determination results by DFT-D quantum mechanic calculations | | | |



| | | | |
|---|-----|---|-----|
| 9:25 SL5 Jaroslav Maixner (VŠCHT Praha) Crystal structure of 3-amino-5-(aminocarbonyl) -2, 4, 6-triiodo-benzoic acid methanol (C ₈ H ₅ I ₃ N ₂ O ₃ .CH ₃ OH) from laboratory powder data | 358 | 14:00 15:50 Session V chair: <i>R. Kužel, J. Hašek</i> | |
| 10:15 <i>Coffee break</i> 10:40 12:50 chair: <i>J. Kulda</i> | | 14:00 L18 Pavel Svoboda (Matematicko-fyzikální fakulta UK Praha) Metody pěstování anorganických krystalů Method of crystal growth of inorganic crystals | |
| 10:40 L17 Stanislav Kamba (Fyzikální ústav AV ČR Praha) Použití infračervené a Ramanovy spektroskopie pro upřesnění krystalových struktur Application of infrared and Raman spectroscopy for structure refinement | 358 | 14:40 L19 Ivana Kutá Smatanová (Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice) Jak připravit krystaly biologických makromolekul? How to grow crystals of biological macromolecules? | 359 |
| 11:10 CL1 Ravi Yellepeddi (Thermo Scientific) Materials Analysis using Real-Time X-ray Diffraction and Advanced XRF | | 15:10 SL6 Tomáš Klumpler (CEITEC, Masarykova univerzita Brno) Bio-SAXS - malouhlý rentgenový rozptyl na biologických vzorcích jako služba Centrální laboratoře RTG difrakce a Bio-SAXS - Biological Small Angle X-ray Scattering services at CEITEC-MU | 359 |
| 11:40 CL2 Boris Míč (Měřicí technika Morava) Prezentace rtg zařízení firmy Bruker Bruker X-ray instruments | | 15:30 SL7 Michal Babiak (CEITEC, Masarykova univerzita Brno) The crystallography of supramolecular complexes based on bambusuril, cucurbituril and similar macrocycles | 359 |
| 12:00 CL3 Peter Oberta (Rigaku Innovative Technologies Prague) Novinky firmy Rigaku Rigaku news | | 15:55 <i>Coffee break</i> 16:20 18:20 Session VII chairs: <i>Daniel Šimek, Pavel Vojtíšek</i> | |
| 12:20 CL4 Novinky firmy Panalytical Panalytical news | | 16:20 SL8 Jiří Hybler (Fyzikální ústav AVČR, Praha) Některé nové poznatky o polytypismu minerálu cronstedtítu Some new findings about the polytypism of the mineral cronstedtite | 360 |
| 13:00 Lunch | | 16:45 SL9 Marian Čerňanský (Fyzikální ústav AVČR, Praha) Aproximace Fourierových koeficientů difrakčních linií Approximation of Fourier coefficients of diffractios profiles | 361 |



| | | | |
|---|----------------------------|--|-----|
| 17:10 SL10 Jiří Čapek (FJFI ČVUT, Praha) Určení zbytkového napětí v duplexních a austenitických ocelích Residual Stress Determination of Duplex and Austenite Steels Machined using Different Tool Geometry | 362 | 9:50 SL13 Jaromír Kopeček (Fyzikální ústav AV ČR Praha) Využití EBSD při studiu kovů s tvarovou pamětí Application of EBSD for study of shape-memory alloys | 367 |
| 17:35 SL11 Erika Samolová (Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach) Príspevok k štúdiu bimetalických zlúčenín na báze Mn(II) a Cu(II) Contribution to study of Cu/Mn heterobimetallic compounds | 364 | 10:15 <i>Coffee break</i> 10:40 12:00 chair: <i>M. Dopita</i> | |
| 18:00 SL12 Anna Vráblová (Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach) Syntéza, charakterizace a krystalové struktury dvou polymorfů [Co ₂ (<i>o-van-en</i>) ₃] ₄ CH ₃ CN Synthesis, characterization and crystal structures of two polymorphs of [Co ₂ (<i>o-van-en</i>) ₃] ₄ CH ₃ CN | 364 | 10:40 SL14 Petr Cejpek (Matematicko-fyzikální fakulta UK Praha) Příprava a charakterizace Ni ₂ MnGa dopovaného indiem Preparation and characterization of Ni ₂ MnGa doped by In | 367 |
| 18.30 Assembly of the CSCA members | | 11:05 SL15 Miroslav Pospíšil (Matematicko-fyzikální fakulta UK Praha) Struktury Sr-fosfonátových vrstev interkalovaných alkandiolů řešených metodami molekulárních simulací Structures of Sr-phosphonate layers intercalated by alkanedioles solved by molecular simulations | 368 |
| 20:00 Dinner | | 11:30 L22 Radomír Kužel (Matematicko-fyzikální fakulta UK Praha) Studium orientovaných vrstev hexagonálních feritů Study of oriented thin films of hexagonal ferrites | 369 |
| Thursday, September 15 | | | |
| 7:30 8:30 Breakfast | | | |
| 8:30 10:20 Session VIII | chair: <i>M. Čerňanský</i> | 12.00 Lunch | |
| 8:30 L20 Milan Dopita (Matematicko-fyzikální fakulta UK Praha) Metoda difrakce zpětně odražených elektronů (EBSD) EBSD method | 365 | | |
| 9:10 L21 Martin Černík (U.S. Steel Košice) Textúrna a mikroštruktúrna analýza metódou EBSD Textural and microstructural analysis by EBSD method in the USSK conditions | 366 | | |