

**STRUKTURA 2017 - PROGRAMME****Monday, June 19**

11:00 13:30 Registration

13:45 Struktura 2017 - Opening

14:00 16:00 Session I

P. Mikulík

14:00

L1

Radomír Kužel

7

(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)

Úvod, poznámky ke zdrojům a detektorům rtg záření

Introduction, notes to X-ray sources and detectors

14:30

L2

Rajmund Mokso

9

(MaxLab IV, Lund)

Zobrazovací metody na synchrotronech a XFEL

Imaging methods on synchrotrons and XFELs

15:20

L3

Jiří Hybler

10

(Fyzikální ústav AV ČR Praha)

Monokystalové metody s registrací na film (2D)

Single crystal methods with film (2D) registration

16:00 *Coffee break*

16:30 19:15 Session II

J. Hašek, V. Petříček

16:30

L4

František Laufek

11

(Česká geologická služba, Praha)

Zkušenosti s provozem pozičně citlivého detektoru

LynxEye XE

Experience with position sensitive detector LynxEye XE

16:50

L5

Ján Moncol

11

(Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU Bratislava)

Skúsenosti z používania difraktometra Stoe StadiVari s Ag a Cu mikrofokusevanými RTG lampami pre chemickú kryštalografiu

Experience with the use of diffractometer Stoe StadiVari with Ag and Cu microfocus X-ray tubes for chemical crystallography

17:15

L6

Michal Dušek

12

(Fyzikální ústav AV ČR Praha)

Mikrofokální difraktometr ve Fyzikálním ústavu: dosažité zkušenosti, zpracování dat v programu Jana2006 a souvislosti s detailní strukturální analýzou

Microfocus diffractometer in the Institute of Physics: own, present experience, data reduction in program Jana2006 and relations to detailed structure analysis

17:45

L7

Jan Rohlíček

13

(Fyzikální ústav AV ČR Praha)

Laboratoř práškové difrakce na oddělení strukturální analýzy ve Fyzikálním ústavu AV ČR, v. v. i.

Laboratory of powder diffraction at the Department of Structure Analysis at the Institute of Physics AS CR

18:15

CL1

Bert Kinneging

66

(Xplores)

The Planet. Portable High-Resolution Powder Diffraction

18:45

L8

Erik Rakovský

15

(Prírodovedecká fakulta UK Bratislava)

Absence znalosti učebnic

The textbook knowledge absence

19:30 Dinner

Tuesday, June 20

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:30 Session III

chair: *Z. Šourek, R. Kužel*

8:30

L9

Peter Oberta

16

(Fyzikální ústav AV ČR Praha)

RTG optika

X-ray optics



9:20 L10 Dominik Kriegner (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Low-temperature diffractometry	16	14:00 15:30 Session V chair: <i>P. Bezdička,</i>	
9:50 CL12 Dubravka Sisak Jung (<i>Dectris</i>) Technical specifications and your data: reading the lines and between the lines	66	14:00 CL5 Andreas Keilbach (<i>Přírodovědecká fakulta UJEP, Ústí nad Labem</i>) Structure Analysis of Drug Delivery Systems with SAXS in the Laboratory	66
10:20 <i>Coffee break</i>		14:30 L13 Pavla Čapková (<i>Přírodovědecká fakulta UJEP, Ústí nad Labem</i>) Výzkumný servis v rámci výzkumné infrastruktury Nano-EnviCz Research service within the framework of infrastructure Nano-EnviCz	21
10:45-12:45 Session IV chair: <i>Z. Šourek, R. Kužel</i>			
10:45 L11 Lukáš Horák (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Rtg charakterizace epitaxních vrstev X-ray characterization of epitaxial thin films	17	14:50 L14 Petr Ryšánek (<i>Přírodovědecká fakulta UJEP, Ústí nad Labem</i>) Strukturální analýza antibakteriálních filtračních médií Structure analysis of antibacterial filtration media	21
11:15 L12 Zdeněk Matěj (<i>MAX IV Laboratory, Lund University, Lund, Sweden</i>) Nové nestandardní modely v MSTRUCTu a nekonvenční analýza nanokrystalických a amorfních materiálů New non-standard models in MSTRUCT and non-conventional analysis of nanocrystalline and amorphous materials	18	15:10 L15 Jiří Novák (<i>Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Brno</i>) Růst a uspořádávání nanočástic - viděno SAXSem Nanoparticles Growth and Ordering – SAXS View	23
11:45 CL3 Peter Oberta (<i>Rigaku Innovative Technologies Prague</i>) Novinky Rigaku 2017/2018 Rigaku News 2017/2018		15:30 <i>Coffee break</i> 15:50 17:10 Session VI chair: <i>M. Jergel</i>	
12:15 CL4 Andreas Stricker (<i>Incoatec</i>) Upgrading Experimental Setups with Incoatec's Micro-focus Source I μ S and/or Scatterless P		15:50 L16 Zdenko Zápražny (<i>Elektrotechnický ústav SAV, Piešťany</i>) Difrakčné povrchy krystalových monochromátorov pripravené pomocou nano-obrabania Diffraction surfaces in X-ray crystal monochromators prepared by nano-machining technique	25
12:50 Lunch		16:10 L17 Edmund Dobročka (<i>Elektrotechnický ústav SAV, Bratislava</i>) Vyhodnocení hustoty threading dislokací v epitaxních vrstvách III-nitridů Evaluation of threading dislocation density in III-nitride epitaxial layers	27



16:30
L18 29
Ondřej Caha
(Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Brno)
Rentgenová difrakce na vrstvách (Al,Ga)N ternárních slitin
Composition and strain determination of (Al,Ga)N alloy films

16:50
L20 31
Jaromír Kopeček
(Fyzikální ústav AV ČR Praha)
Slitiny FeMnGa a NiMnGa ve světle difrakčních a mikroskopických technik
FeMnGa and NiMnGa alloys in the light of the diffraction and microscopy techniques

17:10 *Coffee break*

17:30 18:50 Session VII
chair: *J. Kopeček*

17:30
L21 32
Tomáš Roch
(Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK v Bratislave)
Strukturální vývoj tantalem legovaných tvrdých vrstev Ti-Al-N
Structural evolution of Ta-alloyed Ti-Al-N hard coatings

17:50
L22 33
Jan Drahokoupil
(Fyzikální ústav AV ČR Praha)
Iontová implantace titanu
Ion implantation of Ti

18:10
L23 35
Martin Černík
(U.S. Steel Košice)
Nové poznatky při řešení textur a struktur metodou EBSD
New knowledge of the texture and structure evaluation by EBSD method

18:30
L24 36
Marian Čerňanský
(Fyzikální ústav AV ČR Praha)
Poznámky ke zpracování difrakčních profilů
Comments to treatment of diffraction profiles

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

Wednesday, June 21

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:10 Session VIII
chair: *N. Ganev*

8:30
L25 37
Přemysl Beran
(Ústav jaderné fyziky AV ČR, Řež)
Rozptyl neutronů a jeho komplementarita s rtg difrakcí
What's the matter between neutrons and matter?

9:15
L26 37
Daniel Šimek
(Fyzikální ústav AV ČR Praha)
Statistické sledování tání a růstu krystalů
Statistical watching of melting and growth of crystals

9:40
CL6 67
Stjepan Prugovečki
(Panalytical)
Benchtop XRD PANalytical Aeris

10:10
CL7 67
Jerome Boutant
(Xenocs)
Latest developments in laboratory SAXS/WAXS instruments

10:40 *Coffee break*

11:00 12:30 **Student symposium - Session I**
chair: *Daniel Šimek, Milan Dopita*

11:00
SL1 47
Jiří Čapek
(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)
Reálná struktura feritické oceli a feritická fáze v duplexní oceli po válcování
Real structure of ferritic steel and ferrite phase of duplex steel after rolling

11:20
SL2 48
Petr Veřtát
(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)
Nová fáze v blízkosti martensitické transformace v Ni-Mn-Ga
The {110}-nanotwinned phase in the vicinity of the martensitic transformation in Ni-Mn-Ga



11:40 SL3 Martin Dudr (<i>Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha</i>) Rtg difrakce na slitině s vysokou entropií XRD on a high entropy alloy	50	14:50 SL9 Jakub Rozbořil (<i>Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Brno</i>) In-situ rtg difrakce na derivátu antradiothiophenu In-situ X-ray diffraction annealing study on an anthradithiophene derivative	57
12:00 SL4 Karel Trojan (<i>Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha</i>) Reálná struktura a zbytková napětí v pokročilých svarech studovaná pomocí rentgenové a neutronové difrakce Real Structure and Residual Stresses in Advanced Welds Determined by X-ray and Neutron Diffraction	51	<hr/>	
12:30 Lunch		15:10 <i>Coffee break</i>	
13:30 15:10 Student symposium - Session II chair: P. Čapková, E. Dobročka		15:30 17:10 Student symposium - Session II chairs: Pavlína Řezáčová, Jan Dohnálek	
<hr/>			
13:30 SL5 Michal Čurda (<i>Přírodovědecká fakulta UK Praha</i>) Poškození krystalové struktury galenitů radioaktivním zářením ²¹⁰ Pb Damage of crystal structure of galenites by radiation ²¹⁰ Pb	52	15:30 SL10 Kristýna Rejžková (<i>Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice</i>) Krystalizace proteinu Tt81 z <i>Thermococcus thio-reducens</i> Crystallization studies of protein Tt81 from <i>Thermococcus thio-reducens</i>	58
13:50 SL6 Petr Cejpek (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Příprava a studium struktury slitin Ni ₂ MnGa dopovaných In Preparation and structural study of alloys Ni ₂ MnGa doped with In	54	15:50 SL11 Petra Havlíčková (<i>Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice</i>) Krystalizační studie cukr-fosfatasy DH Tt80 z <i>Thermococcus kodakarensis</i> KOD1 Crystallization studies of newly prepared sugar-phosphatase DH Tt80 from <i>Thermococcus kodakarensis</i> KOD1	58
14:10 SL7 Jaroslav Valenta (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Nízkoteplotní distorze v HoCo ₂ Low-temperature distortions in HoCo ₂	55	16:10 SL12 Ivana Berková (<i>Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice</i>) Krystalizační studie nově izolované halogenalkandehalogenasy DgaA z <i>Glaciecola agarilytica</i> NO ₂ Crystallization studies of recently prepared haloalkandehalogenas DgaA of <i>Glaciecola agarilytica</i> NO ₂	59
14:30 SL8 Petr Doležal (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Strukturální změny v intermetalických sloučeninách (Ce,La)Pd ₂ (Al,Ga) ₂ Structural changes in intermetallic compounds (Ce,La)Pd ₂ (Al,Ga) ₂	55	16:30 SL13 Leona Švecová (<i>Biotechnologický ústav AV ČR - BIOCEV, Vestec</i>) Bilirubin oxidáza: Strukturální analýza komplexů s ligandy v aktivním místě a studie aktivit Structural studies and activity measurement of bilirubin oxidase	59
..		16:50 SL14 Jan Stránský (<i>Biotechnologický ústav AV ČR - BIOCEV, Vestec</i>) A synchrotron tool used to process home source data Synchrotronový nástroj použitý na zpracování dat z laboratorního zdroje	60



17:10 *Coffee break*

17:30 18:50 **Student symposium - Session IV**
chairs: *Ivana Císařová, Pavel Vojtíšek*

17:30
SL15 60

Martin Malý

(*Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha*)
Difrakční limit v makromolekulární krystalografii
Diffraction limit in macromolecular crystallography

17:50
SL16 61

Michal Hegedüs

(*Prírodovedecká fakulta UPJS Košice*)
Kryštalové štruktúry heterospinových komplexov na báze Ni(II) a TCNQ
Crystal structures of heterospin complexes based on Ni(II) and TCNQ

18:10
SL17 62

Petra Masárová

(*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU Bratislava*)
Strukturálna a spektroskopická štúdia komplexů dipikolínátu
Structural and spectroscopic study of copper(II) dipicolinate compounds

18:30
SL18 63

Simona Matejová

(*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU Bratislava*)
Kryštalová štruktúra kokryštálov
Crystal structure of edaravone cocrystals

18:50
SL19 65

Tatyana Prudnikova, Barbora Karaffová

(*Prírodovedecká fakulta JČU České Budějovice*)
Random microseeding application on haloalkane dehalogenase DbeA Cl variant from *Bradyrhizobium elkanii*

19:00 Assembly of the CSCA members

20:00 Dinner

20:15 Meeting of the scientific board of Czech and Slovak Crystallographic Association and IUCr Regional Committee of the Czech and Slovak Crystallographers

Thursday, June 22

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:20 **Session VIII**

chair: *M. Čerňanský*

8:30
L27 38

Marek Kotrlý

(*Kriminalistický ústav Praha*)
Příklady aplikace fázové analýzy ve forenzní praxi – 3
Examples of application of phase analysis in forensic practise – 3

9:00
L28 39

Matej Jergel

(*Fyzikálny ústav SAV Bratislava*)
Separace fází polymer-fulleren pomocí laboratorního in-situ GISAXS a GIWAXS
Polymer-fullerene phase separation by laboratory in-situ GISAXS and GIWAXS

9:30
CL7 68

Till Samtleben

(*Stoe*)
STOE – Tradition of Innovation since 1887

10:00
CL8

Boris Míč

(*Měřicí technika Morava*)
Novinky firmy Bruker
Bruker news

10:30 *Coffee break*

10:50 12:50
chair: *B. Schneider, I Kutá Smatanová*

10:50
L29 42

Jindřich Hašek

(*Biotechnologický ústav AV ČR - BIOCEV, Vestec*)
Dynamická teorie proteinové krystalizace
Dynamic theory of protein crystallization

11:20
L30 43

Jan Dohnálek

(*Biotechnologický ústav AV ČR - BIOCEV, Vestec*)
Vývoj technologií proteinové difrakce
Development of protein diffraction technologies



11:50 L31 Tereza Skálová (<i>Biotechnologický ústav AV ČR - BIOCEV, Vestec</i>) NK buňky, jejich receptory a interakce NK cells, their receptors and interaction	44	12:30 L33 Petr Kolenko (<i>Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha</i>) Validace ligandů v makromolekulárních strukturách Ligand validation in macromolecular structures	46
12:10 L32 Jiří Brynda, Klára Pospíšilová (<i>Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha</i>) Druhá generace inhibitorů uhličitých anhydráz na bázi karboranů The second generation of inhibitors of carbon anhydrases on the base of carboranes	45	12:50 Vyhlášení výsledků studentské soutěže, předání diplomů a cen Ceremony - results of student competition	
		13.15 Lunch	

Contents

Abstracts from Struktura 2017	
Monday, June 19, Session I	7
Monday, June 19, Session II	11
Tuesday, June 20, morning, Session III	16
Tuesday, June 20, morning, Session IV	17
Tuesday, June 20, afternoon, Session V	21
Tuesday, June 20, afternoon, Session VI	25
Tuesday, June 20, afternoon, Session VII	32
Wednesday, June 21, morning, Session VIII	37
Thursday, June 22, morning, Session IX	38
Thursday, June 22, morning, Session X	42
Wednesday, June 21, afternoon, Student Session I	47
Wednesday, June 21, afternoon, Student Session II	52
Wednesday, June 21, afternoon, Student Session III	58
Wednesday, June 21, afternoon, Student Session IV	60
Commercial lectures	66
Programme	69
Author index	79