



## KRYSTALOGRAFICKÁ SPOLE NOST

### Stručný pohled na činnost v letech 2015–2017

V letech 2015-2017 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 strukturní analýze" se konaly následující semináře:

### 297. ROZHOVORY

FJFI VUT, Praha, 6. 2. 2015

#### 60 let Fakulty jaderné a fyzikálně inženýrské VUT

V. Múška: Prášková difrakce na katedře jaderné chemie, V. Šuba: Syntéza a rentgenová difrakce nanoprášků, J. Bárta: Příprava a výzkum nanočástic syntetických granátů, T. Pavelková: Radiační příprava oxidických jaderných paliv, L. Procházková: Fotoindukovaná příprava nanoscintilátorů na bázi ZnO a strukturní analýza, V. Jarý: Scintilátory na bázi ternárních sulfidů, P. Beran: Nano" a "kvazi" v neutronové difrakci, P. Oberta: Difraktometr Rigaku.

Exkurze v laboratořích. KJCH

Organizace: N. Ganey, V. Šuba

### 298. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR v Praze, 6. 11. 2015

#### Krystalografie a rtg metody studia materiálů

V. Janovec: Patří studium doménových struktur do krystalografie?, M. Rieder: Co vypovídá globální statistika mineralogického systému o krystalochemii prvků, D. Korytář: Rtg kryštalová optika, účastníci: Štruktúra a vlastnosti tvrdých povlaků na nástroje. Štruktúrna analýza na Ústave materiálův MTF STU v Trnave, P. Šapková: Kombinace RTG difrakce a molekulového modelování při řešení struktur s omezenou uspořádaností, J. Hašek: Využití rtg difrakce při řešení problému strukturní biologie v rámci projektu BIOCEV, E. Dobroška: Využitie lineárnych skenov pri analýze epitaxných vrstiev. M. Steinhart: SWAXS za vysokých tlakov, R. Kužel: Silnorientované magnetické vrstvy.

Organizace: J. Hašek, R. Kužel

### 299. ROZHOVORY

Ústav materiálův - Materiálovotechnologická fakulta STU (pavilon T), 12. 2. 2016

účastníci: Otvorenie, krátka informácia o výskumnej infraštruktúre, I. Šerníková: Využitie difrakčných metód pri štúdiu štruktúry kvázikryštalického aproximantu? P. Priputen: Využitie metód röntgenovej difrakcie pri analýze fázy  $Y-Al_{13}Co_4$  so zložitou mikroštruktúrou, M. Kusý: Mikroštruktúra a fázové zloženie kalených a popustených ocelí po tvrdom sústružení, M. Šapkovičová: Štúdium nanoštruktúr pomocou transmisného elektrónového mikroskopu s atomárnym rozlíšením, L. Bónová: Plazmové technológie na ATRI a možnosti ich využitia: R. Riedlmajer: Možnosti iónovej implantácie laboratória iónových technológií, J. Dobrovodský: Analýza materiálův na ATRI pomocou iónových zväzkov vrátane kanálovania.

Exkurze do laboratořích Ústavu materiálův a Ústavu výskumu progresivních technologií.

Organizace: účastníci



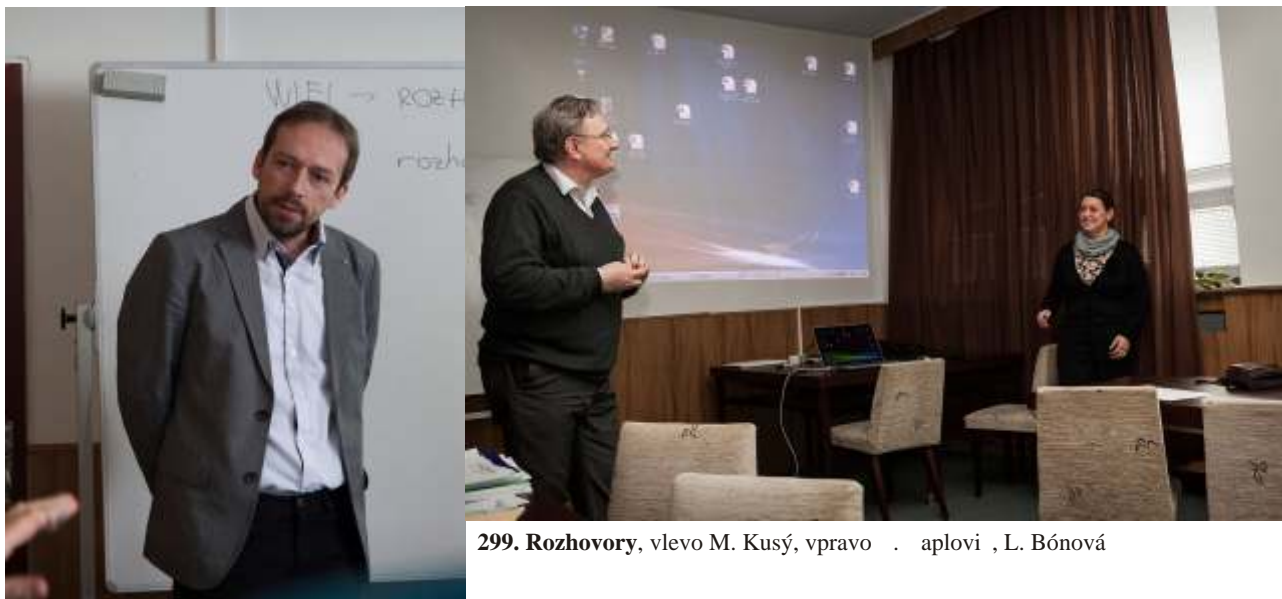
297. Rozhovory, Nikolaj Ganey



V. Jarý, V. Šuba



P. Beran



299. Rozhovory, vlevo M. Kusý, vpravo představitelové, L. Bónová

### 300. ROZHOVORY

Ústav makromolekulární chemie AV ČR v Praze,  
11. 5. 2016

#### Jubilejní 300. Rozhovory

#### 25 let Krystalografické společnosti

R. Kužel, J. Hašek: 25 let Krystalografické společnosti, B. Kratochvíl: Polymorfismus v přírodě, J. Fiala: Nízkoteplotní relaxace a sekundární struktura materiálu, představitelové: Spresování struktur z prášku - pohledy těsně před odchodem, M. Kotrlý: XRD fázová analýza a další rentgenové techniky ve forenzní praxi, P. Strunz: Materiálový výzkum v Laboratoriu neutronové fyziky ÚJF a plánovaný neutronový difraktometr BEER@ESS Lund, M. Dušek: Strukturální analýza ve FZU: stará kocábka má nové plachty a novou posádku, J. Monco, J. Kožíšek: Zaujímavé struktury z dat měřených na novom difrakto-

metri STOE STADIVARI, štúdium elektronickej štruktúry z difrakčných dát, J. Dohnálek: Strukturální biologie ve výzkumném centru BIOCEV, představitelové: Integrativní strukturální biologie v Laboratoriu strukturální biologie na ÚMG a ÚOCHB AV ČR, I. Kutá Smatanová: Laboratoriu strukturální chemie na JU v Českých Budějovicích, P. Šutta: Rentgenová a elektronová difrakce na tenkých vrstvách s distortovanou perovskitovou strukturou, O. Čaha: Rtg difrakce ke studiu ferroelektrických a piezoelektrických tenkých vrstev, R. Kužel: Rtg strukturální analýza na MFF UK. Na které aplikace rgt difrakce pro studium materiálů.

*Organizace:* R. Kužel, J. Hašek



300. Rozhovory



### 301. ROZHOVORY

BIOCEV, Biotechnologický ústav AV ČR, Vestec  
26. 4. 2017

Rozhovory v nované metodám studia molekulárních systémů v rámci projektu Evropské unie a MŠMT. BIOCEV (Společné centrum Akademie věd a Karlovy univerzity ve Vestci) a ELI (Extreme Light Infrastructure)

Joel L Sussman: Proteopedia - a world-wide source of knowledge of structure and function of proteins, B. Schneider: Structural dynamics of biomolecular systems, a joint ELI - IBT project, B. Angelov, J. Andreasson: Present state and future of the X-ray diffraction station at ELI Beamlines, J. Dohnálek: The Czech Infrastructure for Integrative Structural Biology (CIISB), J. Pavlíček: Diffraction techniques in BIOCEV, J. Hašek: Softwarový balík poskytovaný "Cambridge Crystallographic Data Centre", P. Pompach: Strukturální hmotnostní spektrometrie (XR FT-ICR, MALDI, HPCL), A. Benda: Zobrazovací metody, Z. Lánský: Experimentální měření mezimolekulárních interakcí – "optical tweezers".

Schůzka Rady Krystalografické společnosti, návštěva vybraných laboratorí BIOCEV.

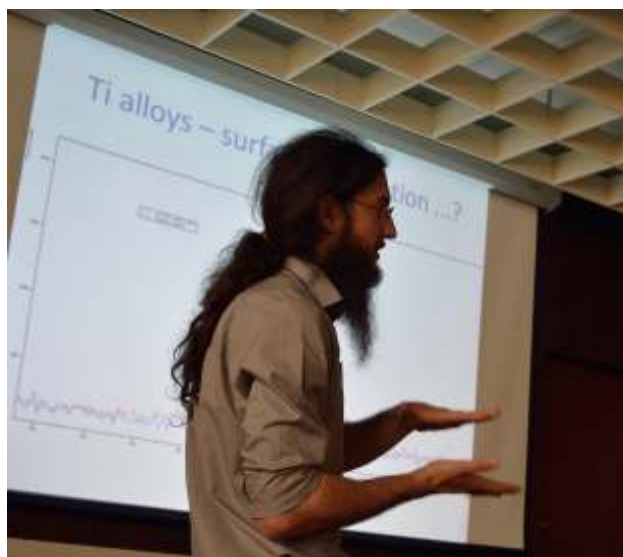
*Organizace:* J. Hašek, B. Schneider

### 302. ROZHOVORY

Ústav molekulární biologie SAV, Bratislava  
11. 10. 2017

Kryštalografia proteinov, ni jednoduchšie?

P. Páchl: Rutinosidase: journey toward the X-ray structure, M. Kugler: Structure-based design of human carbonic anhydrase inhibitors, J. Bauer: The structure and dynamics of the human ryanodine receptor 2 N-terminal domain and its mutants, D. Čierna: Charakterizácia domén ľudského ryanodínového receptora 2 - lepšie porozumenie srdcových arytmií, J. Škerlová: Crystal structure of native  $\beta$ -N-acetylhexosaminidase from *Aspergillus oryzae*: substrate specificity, stability, and regulation by propeptide, M.



Struktura 2015, J. Drahokoupil

Nováková: Towards the structure of metabolic repressor DeoR from *Bacillus subtilis*, R. Škrabana: What can it look like to bind a glycine-rich epitope? O. Cehlár: Crystallographic insights into the binding of intrinsically disordered proline rich tau peptide to antibody Fab fragment, . Urbániková: Atomic resolution and protein flexibility

*Organizace:* . Urbániková

### Struktura 2015

Hotel Adamantino, Luhačovice

22. - 25. 6. 2015

*Hlavní přednášky:*

M. Dušek: Systém pro správu vzorků pomocí internetu: cesta od jednoduché tabulky k monstru, J. Brynda: Upřesňování proteinových struktur na vysokém rozlišení, "lesk a bída" strukturální analýzy biomolekul, M. Babiak, J. Klumpler: Služby centrální laboratoře RTG difrakce v CEITEC-MU v Brně, BioSAXS CEITEC-MU v Brně, M. Kotrlý: Zajímavé případy z praxe Kriminalistického ústavu, J. Drahokoupil: Rentgenová difrakce v praxi, M. Jergel: Kryštalová optika pro tvarování rtg svazku, Z. Matěj: Integrace dat z 2D detektoru při skenovacím práškovém difrakčním experimentu, J. Rohlíček: Řešení struktur z laboratorních práškových difrakčních dat - trendy, možnosti, přehledy.

*Strukturální databáze*

J. Hašek: 50 let Cambridgeské strukturální databáze CSD, B. Schneider: 45 let Proteinové strukturální databanky PDB, J. Monco: Využití CSD na slovenských vysokých školách, F. Laufek: Strukturální typy a anorganická strukturální databáze, R. Kužel: Možnosti užití nové verze databáze práškových difrakčních dat - PDF-4+, volně dostupné strukturální databáze.

*Další přednášky a krátké příspěvky:*

M. Hrbová: The effect of some physical factors on the phase structure of isotactic polybutene -1, E. Dobroka: Měření zbytkových napětí v silně orientovaných vrstvách, M. Černík: Röntgenová difrakční analýza uhlí a koksů, J. Kopeček: Slitiny s tvarovou pamětí studované pomocí



Struktura 2015, E. Dobroka, M. Dopita



Struktura 2015, studentská p ehlídka  
M. Dudr,



Struktura 2015, studentská p ehlídka  
M. Pšeni ka



Struktura 2015, studentská p ehlídka  
P. Ve tát

EBS, D. Šimek: Mikrostruktura tažené pearlitické oceli a její obraz v rtg. difrakci, M. Šeranský: Laserové opracování materiálů, L. Horák: Studium (magneto-)strukturního porušení v tenkých vrstvách FeRh pomocí XRD, T. Roch: Štruktúrna charakterizácia heteroštruktúr plynových senzorov na báze kovových oxidov, R. Uhrecký: The study of preparation of SrAl<sub>12</sub>O<sub>19</sub> thin films, P. Vranec: Stanovenie fázového zloženia aglomerátov metódou röntgenovej difrakcie, J. Novák: Rozmanitosť a systematika struktur binárných systémů organických polovodičů, M. Meduna: Rekonstrukce tvaru mikrokristalu pomocí rtg nanodifrakce na 3D multivrstvách, M. Šlouf: Využití Fourierovy transformace při analýze mikrofotografií II, M. Dopita: Rtg rozptyl na silně porušených uhlíkatých materiálech, J. Monco: Samosporiadanie mednatých karboxylátov do supramolekulových dimérů a supramolekulových sítí prostřednictvím vodíkových vazeb, E. Rakovský: Funkcionalizácia polyoxometalátů komplexami přechodných kovů, B. Schneider: Jemná struktura DNA "duplexu", M. Urbániková: Glukoamylázy ze *Saccharomycopsis fibuligera* - struktura a stabilita, B. Vidová: Aktinofágové endolyzíny: bioinformatická analýza domén a protein-substrát interakcí, R. Chaloupková: Optimalizace rovnováhy mezi aktivitou a stabilitou halogenalkandehalogenas inženýrstvím jejich pístupových tunelů, T. Prudnikova: Structural characterization of haloalkane dehalogenases

P. Oberta: Nový difraktometr Rigaku - SmartLab3,  
J. Gertenbach: News from Panalytical

P. Mikulík: European Synchrotron User Organisation (ESUO) a portál WayForLight.eu, R. Kužel: Mezinárodní rok krystalografie a aktivity Mezinárodní krystalografické unie - IUCr.

## 11. p ehlídka studentských prací z oblasti krystalografie a strukturní analýzy

### Sekce Biokrystalografie:

E. Skoepová: Rtg a NMR studia protonovaného stavu farmaceutických amidů, V. Sládková: Farmaceutické krystaly a jejich aplikace, I. Iermak: Structural characterization of glyceraldehyde dehydrogenase from *Thermoplasma acidophilum*, D. Malakhova: Crystallization of

novel haloalkane dehalogenase DgaA isolated from *Glaciecola agarilytica* NO<sub>2</sub>, K. Tratsiak: Structural characterization of the representative of the alpha/beta-hydrolase superfamily from *Marinobacter* sp. ELB17, D. Jamrichová: Acetyleráza CE16 z huby *Hypocrea jecorina*.

Ocenění získali: I. Iermak, D. Jamrichová, E. Skoepová.

### Sekce Materiály a fyzika:

M. Pšeni ka: Molekulární simulace interakcí nano částic CdS s montmorillonite, J. Rozbořil: Rtg difrakční studium relaxace napětí v mikrokristalech Ge, D. Kašáková: Příprava a charakterizace nanokompozitů Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub> substituovaných skandium, M. Soroka: Příprava orientovaných vrstev Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> rozkladem Na<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub>, J. Šapek: Určování zbytkového napětí v duplexní oceli během termomechanického zpracování, M. Kučeráková: Studium textury metagabro mylonitu pomocí neutronové difrakce, M. Dudr: Srovnání struktury teplotně a tahově indukovaného martenzitu v nitinolu, P. Ve tát: Stanovení koeficientu teplotní roztažnosti skandátu vzácných zemin pomocí rentgenové difrakce, J. Kašlík: Vysokoteplotní RTG prášková difrakce jako nástroj pro monitorování termicky indukovaných transformací b-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> v atmosféře vzácných plynů, P. Cejpek: Studium struktury Heuslerových slitin pomocí rentgenových metod, C. A. Correa: Accuracy of structure analysis of single nanocrystals by PEDT, T. Brunátová: Studium teplotní stability titanátových nanotrubic do 800 °C, J. Šmilauerová: Studium struktury částic fáze omega ve slitinách titanu pomocí rentgenové difrakce.



Struktura 2015, ze studentské p ehlídky



P. Ryšánek



M. Pospíšil



J. Maixner

Struktura 2016

Ocenění v této kategorii získali: J. Rozbořil, C. A. Correa, J. Šmilauerová.

### Kurs - grupy v krystalografii I

R. Kužel, V. Petříček, E. Dobroška

Operace symetrie, definice grupy, n které vlastnosti, skládání operací symetrie, multiplikační tabulky Bodové a rovinné grupy a jejich význam, symetrie rovinných periodických vzorů (příklady). Prostorové grupy, diagramy prvků symetrie a diagramy obecných poloh (příklady) Další vlastnosti grup, podmínky. Vyhasínací podmínky, symetrie difrakčního obrazu. Grupy ve vyšších dimenzích, superprostor, modulované struktury. Symetrie magnetických struktur. Podobnost struktur z hlediska grup, Bärnighausen v strom.

Abstrakty příspěvků :

<http://www.xray.cz/ms/bul2015-3.htm>

Počet účastníků : 82

### Struktura 2016

Hotel Dvořák, Tábor

12. - 15. 9. 2016

### 25 let Krystalografické společnosti

Historie:

R. Kužel: 25 let Krystalografické společnosti, F. Laufek: Krystalografie před Laueho objevem.

Hlavní přednášky:

V. Petříček: Řešení struktur, J. Hašek: Dynamická teorie krystalizace jako nástroj pro kontrolu architektury proteinových krystalů, M. Urbániková: Vliv mutací na strukturu a vlastnosti proteinů, J. Brynda: Carborane and metallacarborane inhibitors of Carbonic Anhydrase IX, promising compounds for therapy, Z. Matěj: Nástroje pro studium nanomateriálů metodou atomové párové

distribuce

funkce, M. Kotrlý: Zajímavosti z fázové analýzy ve forenzní praxi, J. Kulda: Rozptyl neutronů a jeho komplementarita s rtg difrakcí, M. Hušák: Verifikace určení struktury molekulárních krystalů pomocí výpočtu QM-DFT, P. Svoboda: Metody pro studování anorganických krystalů, I. Kutá Smatanová: Jak připravit krystaly biologických makromolekul? R. Kužel: Studium orientovaných vrstev hexagonálních feritů.

Hlavní přednášky - přednážkové techniky:

P. Srb: NMR a rtg difrakce již nejsou nepřátelé, J.řížek: Positronová anihilační spektroskopie, A. Lanok: Netradiční aplikace Mössbauerovy spektroskopie, A. Macková: Energetické iontové svazky pro charakterizaci složení a struktury krystalických materiálů pro optiku a fotoniku, V. Havránek: Iontová mikrosonda - Analýzy a modifikace materiálů energetickými ionty, J.řížek: Atomový tomograf (3D atome probe), P. Mikulík: Rentgenové zobrazovací metody, S. Kamba: Použití infračervené a Ramanovy spektroskopie pro upřesnění krystalových struktur, M. Dopita: Metoda difrakce zpět odražených elektronů (EBSD), M. Černík: Texturní a mikrostrukturní analýza metodou EBSD, J. Kopeček: Využití EBSD při studiu kovů s tvarovou pamětí.

Krátké příspěvky:

P. Ryšánek: Strukturní charakterizace polymerních nanovláknenných textilií, I. Hren: Interakce nylonu 6 s antibakteriálními molekulami, J. Drahokoupil: Nitridace titanu pomocí iontové implantace, J. Maixner: Crystal structure of 3-amino-5-(aminocarbonyl)-2,4,6-triiodobenzoic acid methanol ( $C_8H_5I_3N_2O_3 \cdot CH_3OH$ ) from laboratory powder data, T. Klumpler: Bio-SAXS - malouhý rentgenový rozptyl na biologických vzorcích jako služba Centrální laboratoře RTG difrakce a Bio-SAXS, M. Babiak: The crystallography of supramolecular complexes based on bambusuril, cucurbituril and similar macrocycles, J. Hybler: Některé nové poznatky o polytypismu minerálu cronstedtitu, M. Černý: Aproximace Fourierových koeficientů difrakčních linií, J. Apek: Určení zbytkového





např. v duplexních a austenitických ocelích, E. Samolová: Príspevok k štúdiu bimetalických zliatin na báze Mn(II) a Cu(II), A. Vráblová: Synthesis, characterization and crystal structure of two polymorph modifications  $[\text{Co}_2(\text{o-van-en})_3]_4\text{CH}_3\text{CN}$ , P. Cejpek: Příprava a charakterizace  $\text{Ni}_2\text{MnGa}$  dopovaného indiem, M. Pospíšil: Struktury Sr-fosfonátových vrstev interkalovaných alkanedioly ešených metodami molekulárních simulací.

*Komerční příspěvky:*

R. Yellepedi (Thermo Scientific): Materials Analysis using Real-Time X-ray Diffraction and Advanced XRF, P. Oberta (Rigaku): Novinky firmy Rigaku, B. Míček (Míček technika Morava): Rtg zařízení firmy Bruker.

*Posterová přednáška:*

Abstrakty příspěvků:

<http://www.xray.cz/ms/bul2016-4.htm>

## Struktura 2017

Hotel Antoňov, Telč  
19. - 22. 6. 2017

### Experimentální metody v rtg a neutronové strukturní analýze

*Přednášky:*

R. Kužel: Úvod, poznámky ke zdroji a detektoru, R. Mokso: Zobrazovací metody na synchrotronech a XFEL, J. Hybler: Monokrystalové metody s registrací na film (2D detektory), F. Laufek: Zkušenosti s provozem pozicně citlivého detektoru LynxEye XE, J. Monco: Skúsenosti z používania difraktometra Stoe StadiVari s Ag a Cu mikrofokusanými RTG lampami pre chemickú kryštalografiu, M. Dušek: Mikrofokální difraktometr ve Fyzikálním ústavu: dosavadní zkušenosti, zpracování dat v programu Jana 2006 a souvislosti s detailní strukturní analýzou, J. Rohlíček: Laboratorní práškové difrakce na oddělení strukturní analýzy ve Fyzikálním ústavu AV ČR, v. v. i., E. Rakovský: Absence znalosti u ebnic, P. Oberta: Rtg optika, D. Kriegner: Low-temperature diffractometry, L. Horák: Rtg charakterizace epitaxních vrstev, Z. Matěj: New nonstandard models in MSTRUCT and unconven-

tional analysis, of nanocrystalline and amorphous like materials, P. Šapková: Výzkumný servis v rámci výzkumné infrastruktury NanoEnviCz, P. Ryšánek: Strukturní analýza antibakteriálních filtračních médií, J. Novák: Rost a uspořádání nanočástic - vidno SAXSem. Z. Zápražný: Difrakční povrchy krystalových monochromátorů připravené pomocí nano-obrabaní, E. Dobroška: Vyhodnocení hustoty threading dislokací v epitaxních vrstvách III-nitridů, P. Čaha: Rentgenová difrakce na vrstvách (Al,Ga)N ternárních slitin, J. Kopeček: Slitiny FeMnGa a NiMnGa ve světle difrakčních a mikroskopických technik, T. Roch: Strukturní vývoj tantalem legovaných tvrdých vrstev Ti-Al-N, J. Drahokoupil: Iontová implantace v titanu, M. Černík: Nové poznatky při řešení textur a struktur metodou EBSD, M. Čeranský: Poznámky ke zpracování difrakčních profilů, P. Beran: Co se děje mezi neutrony a hmotou, D. Šimek: Statistické sledování tání a růstu krystalů, M. Kotrlý: Příklady aplikace fázové mikroanalýzy ve forenzní oblasti, M. Jergel: Separace fází polymer-fulleren pomocí laboratorního in-situ GISAXS a GIWAXS, J. Hašek: Dynamická teorie proteinové krystalizace, J. Dohnálek: Vývoj technologií proteinové difrakce, T. Skálová: NK buňky, jejich receptory a interakce, J. Brynda, K. Pospíšilová: Druhá generace inhibitorů uhlíkatých anhydráz na bázi karboranů, P. Kolenko: Validace ligandů v makromolekulárních strukturách.

*Komerční příspěvky:*

B. Kinneging (Xplore): The Planet. Portable High-Resolution Powder Diffraction, D. Sisák Jung (Dectris): Technical specifications and your data: reading the lines and between the lines, P. Oberta (Rigaku): Novinky firmy Rigaku 2017/18, A. Stricker (Incoatec): Upgrading Experimental Setups with Incoatec's Microfocus Source  $\mu\text{S}$  and/or Scatterless Pinholes, A. Keilbach (Paar): Structure Analysis of Drug Delivery Systems with SAXS in the Laboratory, S. Prugovečki (Panalytical): Benchtop XRD PANalytical Aeris, J. Boutant (Xenocs): Latest developments in laboratory SAXS/WAXS instruments, T. Samtleben (Stoe): STOE – Tradition of Innovation since 1887, B. Míček (Míček technika Morava): Rtg zařízení firmy Bruker.



Struktura 2017, P. Oberta



M. Dušek



M. Čeranský



M. Dudr



K. Trojan



I. Berková

## 12. pohledka studentských prací z oblasti krystalografie a strukturní analýzy

### Sekce Materiály a fyzika:

J. Cejpek: Reálná struktura feritické oceli a feritická fáze v duplexní oceli po válcování, P. Vejtát: Nová fáze v blízkosti martensitické transformace v Ni-Mn-Ga, M. Dudr: Rtg difrakce na slitinách s vysokou entropií, K. Trojan: Reálná struktura a zbytková napětí v pokrovených svarech studovaná pomocí rentgenové a neutronové difrakce, M. Čurda: Poškození krystalové struktury galenitu radioaktivním zářením  $^{210}\text{Pb}$ , P. Cejpek: Příprava a studium struktury slitin  $\text{Ni}_2\text{MnGa}$  dopovaných In, J. Valenta: Nízko-temperатурní distorze  $\text{HoCo}_2$ , P. Doležal: Strukturní změny v intermetalických sloučeninách  $(\text{Ce},\text{La})\text{Pd}_2(\text{Al},\text{Ga})_2$ , J. Rozbořil: In-situ rtg difrakce na derivátu antradiithiophenu

Ocenění v této kategorii získali: P. Vejtát, J. Rozbořil, P. Doležal.

### Sekce Biokrystalografie:

K. Rejžková: Krystalizace proteinu Tt81 z *Thermococcus thio-reducens*, P. Havlíková: Krystalizační studie cukrofosfatasy DH Tt80 z *Thermococcus kodakarensis* KOD1, I. Berková: Krystalizační studie nově izolované halogenalkandehalogenasy DgaA z *Glaciecola agarilytica*  $\text{NO}_2$ , L. Švecová: Bilirubin oxidáza: Strukturní analýza komplexu s ligandy v aktivním místě a studie aktivit, J. Stránský: Synchrotronový nástroj použitý na zpracování dat z laboratorního zdroje, M. Malý: Difrakční limit v makromolekulární krystalografii, M. Hegedüs: Kryštalové struktury heterospinových komplexů na bázi  $\text{Ni}(\text{II})$  a TCNQ, P. Masárová: Strukturní a spektroskopické studium komplexu dipikolinátu, S. Matejová: Kryštalová struktura kokryštalů

Ocenění získali: L. Švecová, M. Malý, M. Hegedüs

Počet účastníků : 55

Abstrakty příspěvků :

<http://www.xray.cz/ms/bul2017-1.htm>

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

[www.structbio.org](http://www.structbio.org)

### XIII Discussions in Structural Molecular Biology

Akademické a univerzitní centrum Nové Hradce  
19.–21. 3. 2015

Abstrakty příspěvků :

<http://www.xray.cz/setkani/abst2015/abstracts.htm> (html)

<http://www.xray.cz/ms/bul2015-1.htm> (pdf)

### XIV Discussions in Structural Molecular Biology

Akademické a univerzitní centrum Nové Hradce  
17.–19. 3. 2016

Abstrakty příspěvků :

<http://www.xray.cz/setkani/abst2016/abstracts.htm> (html)

<http://www.xray.cz/ms/bul2016-1.htm> (pdf)

## 1. ročník FEBS-INSTRUCT praktického krystalizačního kurzu ve střední Evropě s názvem ‘Advanced Methods in Macromolecular Crystallization VI’

Akademické a univerzitní centrum Nové Hradce,  
20. 6. – 27. 6. 2014

Na předchozích úspěšných ročníkách FEBS pokrovených krystalizačních kurzů konaných v letech 2004, 2006, 2008, 2010 a 2012 navázal první ročník FEBS-INSTRUCT praktického krystalizačního kurzu pořádaného posledního pracovního týdne 2014. Na kurz přijalo pozvání 24 pracovníků z oblasti proteinové krystalografie jako například Prof. Bernhard Rupp z Hofkristallamt z Vista





XIV Discussions

(USA), Dr. Terese Berfors z Upsalla University (Švédsko), Prof. Christian Betzel z Univ.-klinikum Hamburg (Německo) a další. Akci, která byla pořízena pod záštitou FEBS (Federation of European Biochemical Societies) a INSTRUCT, sponzorovalo 7 zahraničních a 1 česká firma a také Krystalografická společnost. Na základě požadovaných kritérií bylo na kurz vybráno 29 studentů z českých a z ostatních evropských zemí. V dopoledních cyklech přednášek se studenti seznámili s metodami izolace, purifikace a krystalizace proteinů. Obeznamenali se nejen se standardními postupy, ale také s nejnovějšími trendy. V odpoledních hodinách si v rámci praktické výuky vyzkoušeli vše, co se dozvěděli na přednáškách. Praktická cvičení se konala v místech kurzu v Laboratorii biomolekulární krystalogeneze a krystalografie. V rámci jednotýdenního pobytu byl zajištěn kromě vědeckého 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 Španělskou školou proteinové krystalografie označen za jeden z nejlépe organizovaných krystalizačních kurzů na světě. Veškeré informace o krystalizačních kurzech pořízených na

Nových Hradech jsou uvedeny na internetové adrese <http://febs.img.cas.cz>

*Počet účastníků: 29, počet přednášejících: 26*

Abstrakty příspěvků byly tištěny v Materials Structure, vol. 21, no. 2a (2014). [www.xray.cz/ms/bul2014-2a.htm](http://www.xray.cz/ms/bul2014-2a.htm)

### **"Pokročilé metody v makromolekulární krystalizaci VII" - 2. FEBS praktický krystalizační kurs ve střední Evropě spolufinancovaný INSTRUCT**

Akademické a univerzitní centrum v Nových Hradech  
27. 6. - 2. 7. 2016

Webová stránka <http://febs.img.cas.cz>

Kurz byl organizován pod hlavní záštitou FEBSu a spolufinancovaný INSTRUCTem. Devět dalších firem sponzorovalo kurz především materiálem a vybavením pro laboratorní cvičení a také zaplacením registračního poplatku pro čtyři vybrané studenty (česká společnost pro strukturní biologii). 32 lektorů s vysokým renomé v oblasti krystalizace proteinů a krystalografie přijalo pozvání pořadatelů. Bylo uspořádáno 28 dopoledních a 2 večerní přednášky. Studenty (15) a studentky (24) přivítal děkan Přírodovědecké fakulty Jihočeské univerzity, jakož i předseda FEBS ACC. V programu byly představeny: standardní, pokročilé metody izolace a čištění proteinů, nukleace, krystalové morfologie a rystalové mechanizmy, screening a optimalizace krystalizace s použitím standardních, pokročilých a alternativních technik, olověná strategie, krystalizace membránových proteinů, krystalizace v mikrofluidních čípcích, manipulace s krystaly, upevnění a kryochlazení, fluorescenční metody krystalizace, dynamický rozptyl světla, neutronová krystalografie, přístup ke krystalizaci proteinů ve farmaceutickém průmyslu, stejně jako práce s krystalizačním robotem a měřením krystalů za použití proteinového difraktometru. Přednáška "Historický pohled na krystalizaci proteinů od roku 1840 do současnosti", poskytla studentům fakta od minulosti až do současnosti. Během čtyř hodin odpoledních praktických cvičení zaměřených na 15 různých témat studenti získali



FEBS 2014



nové znalosti a využívali standardní a pokročilé krystalizační metody k růstu krystalů vlastních proteinů (20 z nich přineslo vlastní proteiny) případně i vybraných modelových proteinů. Kurz byl velmi úspěšný pro 2 studenty, kteří během kurzu našli výchozí krystalizační podmínky a krystaly úspěšně vypěstovali. Během celého kurzu bylo vystaveno 27 posterů. Pro poster bylo oceněno cenou - knihou Bernharda Ruppů, dvěma knihami prof. Juan Manuel García-Ruize a dalšími dvěma knihami, které darovala Mezinárodní krystalografická unie IUCr. Ve foyeru byla instalována výstava plakátů CRISTALES vytvořených ve Španělsku u příležitosti Mezinárodního roku krystalografie.

Většina účastníků byla velmi spokojena s výdejkým a společným programem kurzu. Těšíme se na další podobný kurs plánovaný na rok 2018.

*Poděkování účastníkům: 39*

Abstrakty příspěvků byly otištěny v *Materials Structure*, vol. 21, no. 2a (2014). [www.xray.cz/ms/bul2014-2a.htm](http://www.xray.cz/ms/bul2014-2a.htm)

*Organizátoři kurzu: Ivana Kutá Smatanová, Pavlína Jeřáková, Juan Manuel García-Ruiz*

### **Proteins in action – biophysical techniques for protein research**

eské Budějovice, Czech Republic, June 26-28, 2017

Přirodovědecká fakulta JU zorganizovala a ve dnech 26.-28.6.2017 hostila první symposium pojednávající o biofyzikálních metodách používaných pro studium proteinů. Hlavní organizátorkou byla doc. Ivana Kutá Smatanová, s organizací jí pomáhali dr. Pavlína Jeřáková (ÚOCHB AV

R, Praha), dr. Jeroen Mesters (University of Lübeck, Německo) a prof. Beata Vertessy (Institute of Enzymology HAS Budapešť, Maďarsko). Symposium bylo nazváno „Proteiny v akci - biofyzikální techniky pro výzkum proteinů“ a bylo koncipováno tak, aby seznámilo účastníky s výhodami racionálnějších přístupů k používání a kombinaci různých biofyzikálních technik pro výzkum vlastností, funkce a struktury proteinů. Byla pozvána řada významných odborníků z různých výzkumných oborů. Naše pozvání přijalo 11 přednášejících ze zahraničí a deset z ČR. Zástupci sponzorujících firem přinesli přednášky a v odpoledním bloku praktických cvičení seznámili účastníky s použitím jejich přístrojů. V rámci třídenního symposia zaznamenalo 26 přednášek, z toho dvě plenární a dvě studentské (vybrané z posterů) a dále proběhly 4 laboratorní cvičení, v rámci kterých si účastníci mohli otestovat vlastní vzorky. Symposia se zúčastnilo celkem 65 účastníků, kteří na závěr vyhodnotili jeho úroveň formou dotazníku. Lze konstatovat, že všichni byli s akcí maximálně spokojeni a tak organizátoři zvažují další ročník, který se pravděpodobně uskuteční buď opět v eských Budějovicích nebo v Hamburku v roce 2019. Veškeré informace o symposiu jsou k nalezení na [www.xray.cz/pa](http://www.xray.cz/pa). Abstrakty příspěvků byly otištěny v *Materials Structure*, díl 24, č. 2, 2017 viz <http://www.xray.cz/ms/bul2017-2.htm>.

*Ivana Kutá Smatanová*



Proteins in Action 2017



## Odborná skupina chémie a fyziky tuhých látek

### Development of Material Science i Research and Education

Hlavní akcí po ádanou Odbornou skupinou jsou konference/seminá e *Development of Materials Science in Research and Education (DMSRE)*. První seminá se uskute nil v roce 1990 v Gab íkovu. Od té doby je organizuje *Odborná skupina chémie a fyziky tuhých látek* ve spolupráci eskoslovenskou spolo ností pro r st krystal , st ídav na Slovensku a v eské republice, obvykle za átkem zá í. Dalšími spoluorganizátory jsou Fakulta chemické a potravinárskej technológie STU, Materiálovotechnologická fakulta STU, KS, Regionální komitét eských a slovenských krystalograf a Slovenská spolo nos priemyselnej chémie.

V posledních letech se st ídají dv í místa konference a to Pavlov v R (hotel IRIS) a Kežmarské Žlaby v SR.

Program seminá e je tradi n v novaný t mto základním problém m:

- Trendy rozvoje materiálových v d
- Výuka materiálových v d na vysokých školách
- Informace o projektech institucí
- Informace o nových za ízeních na p ípravu a charakterizaci materiál
- Výsledky vlastní výzkumné innosti

Ú ast se pohybuje kolem 35-40 ú astník . Texty k p ednáškám jsou tradi n publikované ve sborníku seminá e s ISBN resp. v asopise Journal CERAMICS - SILIKÁTY.

Veškeré informace o innosti OS CHFTL jsou na www stránce OS <http://oschftl.bts.sk>. o výše uvedených seminá ích na stránkách eskoslovenské spole nosti pro r st krystal (CSACG) <http://csacg.fzu.cz/> resp. <https://dms.fzu.cz/>.



DMSRE27 v Kežmarských Žlaboch (2017)

## V decká rada Krystalografické spole nosti 2013–2016

V tomto období pracovala rada ve složení: Ji í Brynda, Jaroslav Fiala, Nikolaj Ganev, Jind ich Hašek, Jaromír Hrdý, Ji í Hybler, Ji í Kulda, Ivana Kutá Smatanová, Radomír Kužel, Petr Mikulík, Bohdan Schneider, Zbyn k Šourek, ubica Urbániková

### Volby nové v decké rady

Na kolokviu Struktura 2016 v Tábo e, dne 13. 9. byly ukon eny volby v decké rady na další, tentokrát p íleté, období. Hlasování probíhalo p ed tím i koresponden n . Volební komise ve složení, p edseda: Pavel Vojtíšek (p edseda), lenové: Marian er anský, Ivana Císarová porovnávala hlasovací obálky se seznamem Krystalografické spole nosti (všechny hlasy odpovídaly len m spole nosti, nikdo nehlasoval dvakrát). Komise rozlepila obálky, vyjmula lístky a zlikvidovala obálky, se etla hlasy. P edseda komise pak zve ejnil po adí prvních 13 kandidátů s nejvyšším po tem obdržených hlasy.

## V decká rada Krystalografické spole nosti 2017–2021

RNDr. Petr Bezdi ka, CSc. (1959)

Ústav anorganické chemie  
Akademie v d eské republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Ji í Brynda, CSc. (1962)

Ústav molekulární genetiky  
Akademie v d eské republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Milan Dopita, Ph.D. (1978)

Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Praha

prof. Ing. Nikolaj Ganev, CSc. (1953)

Fakulta jaderná a inženýrská VUT, Praha

RNDr. Jind ich Hašek, DrSc. (1945)

Biotechnologický ústav,  
Akademie v d eské republiky, v.v.i., Vestec

ing. Ji í Kulda, CSc. (1953)

Institute of Laue-Langevin  
Grenoble, France

doc. Mgr. Ivana Kutá Smatanová, PhD (1973)

P írodov decká fakulta, Jiho eská univerzita  
v eských Bud jovicích

prof. RNDr. Radomír Kužel, CSc. (1955)

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzita Karlova, Praha

doc. RNDr. Petr Mikulík, PhD (1969)

P írodov decká fakulta Masarykovy Univerzity, Brno

RNDr. Pavlína Malloy ezá ová, Ph.D. (1974)

Ústav molekulární genetiky, Ústav organické chemie a biochemie, Akademie v d eské republiky, v.v.i., Praha





ing. Bohdan Schneider, CSc. (1957)  
Biotechnologický ústav,  
Akademie v d ěské republiky, v.v.i., Vestec

RNDr. Zbyn ěk Šourek, CSc. (1948)  
Fyzikální ústav  
Akademie v d ěské republiky, v.v.i., Praha

RNDr. ubica Urbániková, CSc. (1960)  
Ústav molekulárnej biologie SAV, Bratislava

Nová v decká rada na svém prvním zasedání zvolila funkcioná e Krystalografické spole nosti.

## Redakce spole nosti

asopis spole nosti vychází pod jménem “Materials Structure in Chemistry, Biology, Physics and Technology”, ISSN 1211-5894.

V decké lánky podléhají recenznímu ízení a jsou p íjí-mány v angli tin , eštín i slovenštín . Redak ní rada m že zasláný p ísp vek odmítnout, pokud se domnívá, že koncep n nepadá do redak ního plánu. lánky z asopisu jsou voln dostupné ve formátu PDF na adrese: <http://www.xray.cz/ms. ických asopis>

## INTERNET

Adresa WWW serveru: <http://www.xray.cz>  
Prosíme o návrhy jak zlepšit nápl , formu a obsah. Nap íklad zasláním vhodných odkaz ů na vhodné WWW stránky.

## Grantové projekty

Spole nost podpo í vhodné iniciativy a projekty prosp šné pro rozvoj krystalografie a obor s ní souvisejících.

### lenství v Krystalografické spole nosti

Registrace zájemc ů o innost Krystalografické spole nosti na [www.xray.cz](http://www.xray.cz) není spojena s povinností platit lenský poplatek.

Plné lenství ve Spole nosti spojené s právem volit a být volen do v decké rady a funkcí, a spolurozhodovat o zále-žitostech však žadatel získá až po zaplacení lenského p ísp vku v daném roce. lenský poplatek lze zaplatit bu spole nou platbou s konferen ním poplatkem na konfe-rencích po ádaných Krystalografickou spole ností (pod-robností na [www stránkách p íslušné akce](http://www. stránkách p íslušné akce)) nebo samostatnou platbou platební kartou i p evodem.

lenský poplatek zahrnuje vložné a ob erstvení na Rozho-vorech (3-4 jednodenní seminá e o strukturní analýze na r zných místech R resp. SR), zasílání informa ních materiál ů a “Materials Structure in Chemistry, Biology, Physics and Technology” n kolikrát ro n . lenové rovn ž mohou na Internetu inzerovat a také vyhledávat základní informace v databázích KS.

### Práva a výhody len Spole nosti:

možnost volit, být volen a ú astnit se rozhodování o in-nosti Spole nosti a Regionálního komitétu IUCr;

možnost zú astnit se konkurzu na poskytnutí stipendia na konferenci Spole nosti a n které další akce na nichž se

Spole nost podílí. Stipendium m že ud lit bu organiza ní výbor p íslušné akce, nebo m že ú ast na akci dotovat výbor Spole nosti. Zpravidla se poskytují slevy vložného;

možnost podat vlastní výzkumný projekt grantové agen-tu e prost ednictvím Krystalografické spole nosti;

lepší dostupnost informací týkajících se krystalografie, materiálového výzkumu, strukturní analýzy, atd;

navrhnout z ízení a ú astnit se aktivit specializovaných odborných skupin;

organizovat za pomoci Krystalografické spole nosti seminá i konferenci specializovanou na vybrané téma;

sdužovat prost edky k zakoupení i pronájmu spole n sdílených prost edk (nap . pronájem databází);

organizovat prost ednictvím Krystalografické spole nosti mnohostrannou spolupráci s právními subjekty v R, SR, p ípadn v zahrani í;

podávat návrhy na ud lení cen v oblasti krystalografie;

podávat prost ednictvím Spole nosti návrhy na kandidáty do komisí IUCr, do ECA a ostatních mezinárodních orga-nizací spolupracujících s Krystalografickou spole ností.

## Sekretariát spole nosti

innost spole nosti ídí sekretariát spole nosti ve složení:

### P edseda:

RNDr. Jind ich Hašek, DrSc  
Biotechnologický ústav AV R  
Pr myslová 595, 252 50 Vestec  
Tel.+420-325873787,  
Mobil: +420-728123769  
E-mail: [hasek@imc.cas.cz](mailto:hasek@imc.cas.cz)

### Místop edseda:

RNDr. Zbyn ěk Šourek, CSc.  
Fyzikální ústav AV R  
Na Slovance 2  
182 21 Praha 8  
Tel. +420 266 052 892  
E-mail: [sourek@fzu.cz](mailto:sourek@fzu.cz)

### Místop edsedkyn :

doc. Ivana Kutá Smatanová, PhD  
Jiho eská univerzita  
v eských Bud jovicích  
Branišovská 1760  
370 05 eské Bud jovice  
Tel. +420 608106109  
E-mail: [kuta@prf.jcu.cz](mailto:kuta@prf.jcu.cz)

### Tajemník

prof. RNDr. Radomír Kužel, CSc.  
Matematicko-fyzikální fakulta UK,  
Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2  
Tel: 00420-951551394  
E-mail: [kuzel@karlov.mff.cuni.cz](mailto:kuzel@karlov.mff.cuni.cz)



## Regionální komitét IUCr

Po dohodě s AV ČR a rozhodnutím Rady KS ze dne 20. 6. 2017 byl regionální komitét zařazen do Krystalografické společnosti (česká část). O příspěvek na členský poplatek IUCr je nadále žádána AV ČR.

doc. RNDr. Petr Mikulík, PhD (předseda)

Průrodovědecká fakulta

Masarykova univerzita v Brně

prof. Ing. Marian Koman, DrSc. (místopředseda)

Katedra anorganické chemie, STU Bratislava

doc. Mgr. Ivana Kutá Smatanová, PhD (tajemnice)

Průrodovědecká fakulta, Jihočeská univerzita

v Českých Budějovicích

doc. Ing. Lubomír Šlapal, PhD.

Materiálově technická fakulta, STU Trnava

prof. RNDr. Juraj Černák, CSc.

Průrodovědecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika,

Košice

doc. Ing. Ján Moncoš, DrSc.

Katedra anorganické chemie, STU Bratislava

prof. Ing. Nikolaj Ganev, CSc.

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, VUT Praha

*R. Kužel, J. Hašek*

komise pro mezinárodní krystalografické tabulky, dr. Lukáš Palatinus (FZÚ AV ČR, Praha) – komise pro krystalografické výpočty a komise pro elektronovou krystalografii, doc. Jozef Kožíšek (STU Bratislava) – komise pro nábojové, spinové a momentové hustoty.

## 25. kongres IUCr v Praze 2020

Kongres se uskuteční v období 22.8.-30.8.2020 v Kongresovém centru Praha.

Přípravy kongresu byly zahájeny ([www.iucr25.org](http://www.iucr25.org) resp. [www.xray.cz/iucr](http://www.xray.cz/iucr)). Hlavním organizátorem kongresu je Krystalografická společnost, předsedou konference R. Kužel, předsedkyní mezinárodního programového výboru I. Kutá Smatanová, předsedkyní organizačního výboru je P. Malýová a předsedou národního poradního výboru předseda KS J. Hašek. Byla také zahájena spolupráce s PCO Auletris (M. Haloun).

V průběhu jara 2018 bude sestaven mezinárodní programový výbor (IPC), který by se měl sejít na jaře 2019 v Praze a připravit program kongresu. Sestavení výboru, výborů zvaných přednášek (plenárních a keynote) stejně jako výborů předsed sekcí podléhá pravidlům IUCr. Výbor je dominantně sestaven na základě nominací odborných komisí IUCr, které také navrhují témata zvaných přednášek, mikrosymposií a jejich předsedy.

## IUCr -

### International Union of Crystallography

#### Mezinárodní krystalografická unie

#### Výbory a komise IUCr

R. Kužel je členem výkonného výboru IUCr. Účastnil se schůzí výboru v Rovinji v roce 2015 a v Denveru v roce 2016. Kromě toho také schůzce programového výboru 24. kongresu v Hyderabadu v březnu 2016 spolu s I. Kutou Smatanovou jako předsedkyní programového výboru 25. kongresu v Praze.

V komisích IUCr pracují v současnosti: dr. Margarida Henriques (FZÚ AV ČR, Praha) - komise pro magnetické struktury, ing. Bohdan Schneider (Biotechnologický ústav AV ČR, Praha) - biologické makromolekuly, dr. Petr Bezdička (Ústav anorganické chemie AV ČR, Píseň u Prahy), komise pro umění a kulturní dědictví, dr. Michal Dušek (FZÚ AV ČR, Praha) - komise pro aperiodické krystaly, komise pro krystalografickou nomenklaturu a

