

## KRYSTALOGRAFICKÁ SPOLEČNOST

### Stručný přehled činnosti v letech 2015–2017

V letech 2015–2017 byla Krystalografická společnost pořadatelem či spolupředatelem tradičních Rozhovorů, kolokvií Struktura a dalších akcí.

### Rozhovory, konference

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

#### 297. ROZHOVORY

FJFI ČVUT, Praha, 6. 2. 2015

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

V. Múčka: Prášková difrakce na katedře jaderné chemie, V. Čuba: Syntéza a rentgenová difrakce nanoprášek, J. Bárta: Příprava a výzkum nanočástic syntetických granátů, T. Pavelková: Radiační příprava oxidických jaderných paliv, L. Procházková: Fotoindukovaná příprava nanoscintilátorů na bázi ZnO a strukturální 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. Čuba

#### 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, L. Čaplovič: Štruktúra a vlastnosti tvrdých povlakov na nástroje. Štruktúrna analýza na Ústave materiálův MTF STU v Trnave, P. Čapková: Kombinace RTG difrakce a molekulového modelování při řešení struktur s omezenou uspořádaností, J. Hašek: Využití rtg difrakce při řešení problémů strukturální biologie v rámci projektu BIOCEV, E. Dobročka: Využitie lineárnych skenov pri analýze epitaxných vrstiev. M. Steinhart: SWAXS za vysokých tlaků, R. Kužel: Silně orientované magnetické vrstvy.

Organizace: J. Hašek, R. Kužel

#### 299. ROZHOVORY

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

L. Čaplovič: Otvorenie, krátka informácia o výskumnej infraštruktúre, I. Černíčková: 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. Čaplovičová: 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 laboratoří Ústavu materiálův a Ústavu výskumu progresivních technologií.

Organizace: L. Čaplovič



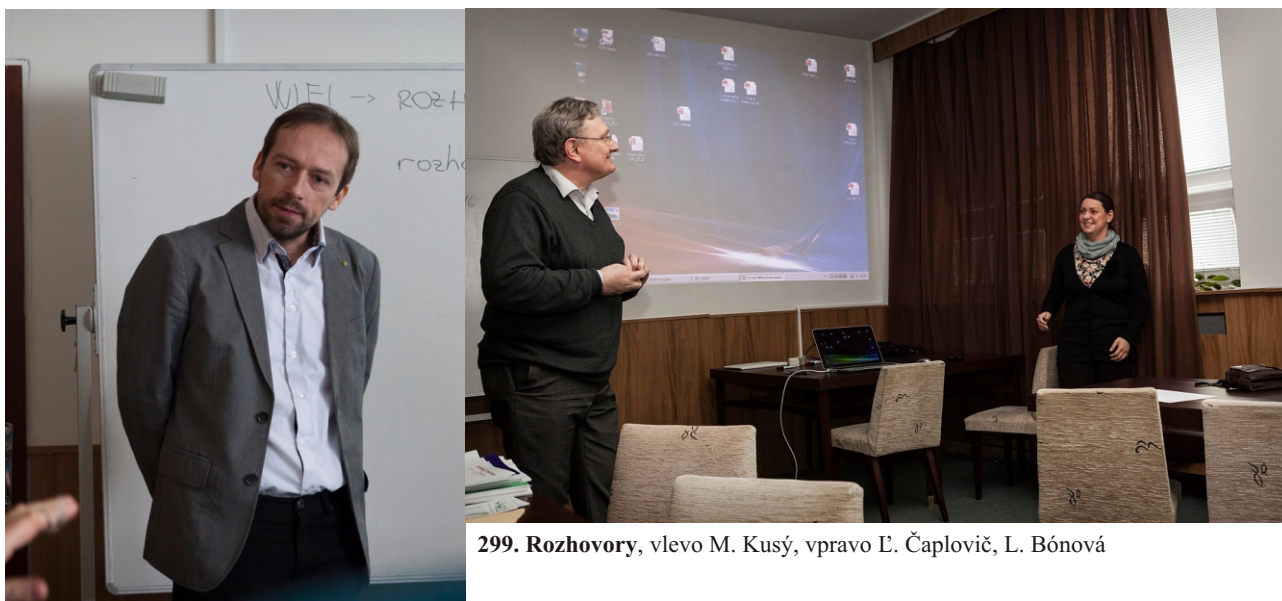
297. Rozhovory, Nikolaj Ganey



V. Jarý, V. Čuba



P. Beran



299. Rozhovory, vlevo M. Kusý, vpravo L. Čaplovič, 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, L. Smrčok: Spresňovanie štruktúr z prášku - pohľad tesne pred dôchodkom, M. Kotrlý: XRD fázová analýza a ďalší rentgenové techniky ve forenzní praxi, P. Strunz: Materiálový výzkum v Laboratoři neutronové fyziky ÚJF Řež a plánovaný neutronový difraktometr BEER@ESS Lund, M. Dušek: Strukturní analýza ve FZU: stará kocábka má nové plachty a čínorodou posádku, J. Moncol, J. Kožíšek: Zaujímavé štruktúry z dát meraných na novom difrakto-

metri STOE STADIVARI, štúdium elektronevej štruktúry z difrakčných dát, J. Dohnálek: Strukturní biologie ve výzkumném centru BIOCEV, P. Řezáčová: Integrativní strukturní biologie v Laboratoři strukturní biologie na ÚMG a ÚOCHB AV ČR, I. Kutá Smatanová: Laboratoř strukturní 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 feroelektrických a piezoelektrických tenkých vrstev, R. Kužel: Rtg strukturní analýza na MFF UK. Některé aplikace rtg difrakce pro studium materiálů.

*Organizace:* R. Kužel, J. Hašek



300. Rozhovory



### 301. ROZHOVORY

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

Rozhovory věnované metodám studia molekulárních systémů v rámci projektů Evropské unie a MŠMT. BIOCEV (Společné centrum Akademie věd a Karlovy university 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".

Schůze Rady Krystalografické společnosti, Návštěva vybraných laboratoří BIOCEV.

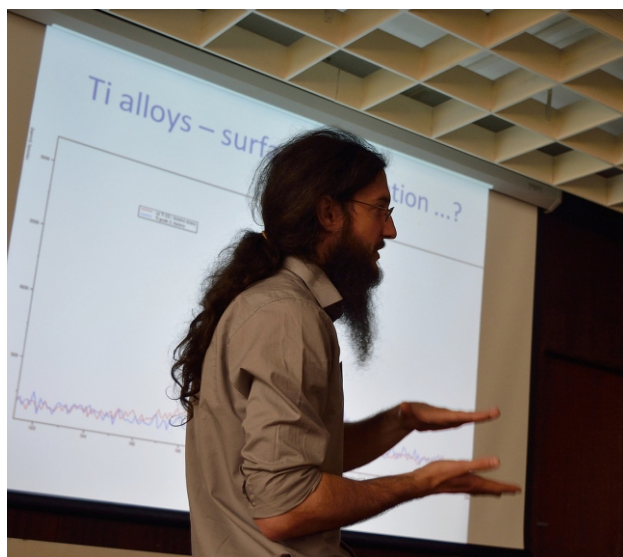
*Organizace:* J. Hašek, B. Schneider

### 302. ROZHOVORY

Ústav molekulárnej biológie SAV, Bratislava  
11. 10. 2017

Kryštálografia proteínov, nič jednoduchšie?

P. Pachtl: 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, L. Urbániková: Atomic resolution and protein flexibility

*Organizace:* L. 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 monstři, 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 pre tvarovanie rtg zväzku, Z. Matěj: Integrace dat z 2D detektoru při skenovacím práškovém difrakčním experimentu, J. Rohlíček: Řešení struktur z laboratorních práškových difrakčních dat - trendy, možnosti, příklady.

*Strukturální databáze*

J. Hašek: 50 let Cambridgeské strukturální databáze CSD, B. Schneider: 45 let Proteinové strukturální databanky PDB, J. Moncol: 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:*

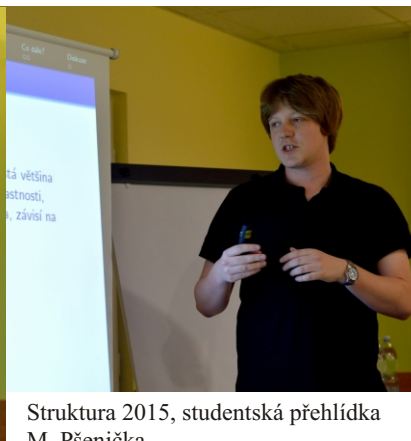
M. Hřibová: The effect of some physical factors on the phase structure of isotactic polybutene -1, E. Dobročka: Meraní zbytkových napetí v silne orientovaných vrstvách, M. Černík: Röntgenová difrakčná analýza uhlia a koxu, J. Kopeček: Slitiny s tvarovou pamětí studované pomocí



Struktura 2015, E. Dobročka, M. Dopita



Struktura 2015, studentská přehlídka  
M. Dudr,



Struktura 2015, studentská přehlídka  
M. Pšenička



Struktura 2015, studentská přehlídka  
P. Veřtát

EBSD, D. Šimek: Mikrostruktura tažené pearlitické oceli a její obraz v rtg. difrakci, M. Čerňanský: Laserové opracování materiálů, L. Horák: Studium (magneto-)strukturního přechodu v tenkých vrstvách FeRh pomocí XRD, T. Roch: Štruktúrna charakterizácia heteroštruktúr plynových senzorov na báze kovových oxidov, R. Uhrecký: The study of preparation of  $\text{SrAl}_{12}\text{O}_{19}$  thin films, P. Vranec: Stanovenie fázového zloženia aglomerátov metódou röntgenovej difrakcie, J. Novák: Rozmanitosť a systematika struktur binárných smesí organických polovodičov, M. Meduňa: 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. Moncoř: Samosporiadanie mednatých karboxylátov do supramolekulových dimérov a supramolekulových sietí prostredníctvom vodíkových väzieb, E. Rakovský: Funkcionalizácia polyoxometalátov komplexami prechodných kovov, B. Schneider: Jemná struktura DNA "duplexu", L: Urbániková: Glukoamylázy zo *Saccharomycopsis fibuligera* - struktura a stabilita, B. Vidová: Aktinofágové endolyzíny: bioinformatická analýza domén a proteín-substrát interakcií, R. Chaloupková: Optimalizace rovnováhy mezi aktivitou a stabilitou halogenalkandehalogenas inženýrstvím jejich přístupových 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. přehlídka studentských prací z oblasti krystalografie a strukturní analýzy

### Sekce Biokrystalografie:

E. Skořepová: 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*  $\text{NO}_2$ , 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. Skořepová.

### Sekce Materiály a fyzika:

M. Pšenička: Molekulární simulace interakcí nanočástic CdS s montmorillonite, J. Rozbořil: Rtg difrakční studium relaxace napětí v mikrokristalech Ge, D. Kaščáková: Příprava a charakterizácia nanokompozitov  $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$  substituovaných skandiom, M. Soroka: Příprava orientovaných vrstiev  $\text{Co}_3\text{O}_4$  rozkladem  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ , J. Čapek: 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 nitanolu, P. Veřtát: Stanovení koeficientu teplotní roztažnosti skandátu vzácných zemin pomocí rentgenové difrakce, J. Kašlík: Vysokoteplotní RTG prášková difrakce jako nástroj pro monitorování termicky indukovaných transformací b- $\text{Fe}_2\text{O}_3$  v atmosféře různých 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 nanotrubeček do 800 °C, J. Šmilauerová: Studium růstu částic fáze omega ve slitinách titanu pomocí rentgenové difrakce.



Struktura 2015, ze studentské přehlídky





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. Dobročka

Operace symetrie, definice grupy, některé 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, třídy. Vyhasinací podmínky, symetrie difrakčního obrazu. Grupy ve vyšších dimenzích, superprostor, modulované struktury. Symetrie magnetických struktur. Podobnost struktur z hlediska grup, Bärnighausenův 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, E. Urbániková: Vplyv 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

distribuční

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 výpočtů QM-DFT, P. Svoboda: Metody pěstování anorganických krystalů, I. Kutá Smatanová: Jak připravit krystaly biologických makromolekul? R. Kužel: Studium orientovaných vrstev hexagonálních feritů.

*Hlavní přednášky - příbuzné techniky:*

P. Srb: NMR a rtg difrakce již nejsou nepřátelé, J. Čížek: Positronová anihilační spektroskopie, A. Lančok: 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. Čížek: 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 zpětně odražených elektronů (EBSD), M. Černík: Textúrna a mikrostruktúrna analýza metodou EBSD, J. Kopeček: Využití EBSD při studiu kovů s tvarovou pamětí.

*Krátké příspěvky:*

P. Ryšánek: Strukturní charakterizace polymerních nanovlákných 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-triiodo-benzoic acid methanol ( $C_8H_5I_3N_2O_3 \cdot CH_3OH$ ) from laboratory powder data, T. Klumpler: Bio-SAXS - maloúhlý 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. Čerňanský: Aproximace Fourierových koeficientů difrakčních linií, J. Čapek: Určení zbytkového



napětí v duplexních a austenitických ocelích, E. Samolová: Príspevok k štúdiu bimetalických zlúčenín 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 řešených 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. Míč (Měřicí technika Morava): Rtg zařízení firmy Bruker.

Počet účastníků: 55

Abstrakty příspěvků:

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

### Struktura 2017

Hotel Antoň, Telč  
19. - 22. 6. 2017

#### Experimentální metody v rtg a neutronové strukturní analýze

##### Přednášky:

R. Kužel: Úvod, poznámky ke zdrojům a detektorům, R. Mokso: Zobrazovací metody na synchrotronech a XFEL, J. Hybler: Monokrystalové metody s registrací na film (2D detektory), F. Laufek: Zkušenosti s provozem pozičně citlivého detektoru LynxEye XE, J. Moncol: Skúsenosti z používania difraktometra Stoe StadiVari s Ag a Cu mikrofokusanými RTG lampami pre chemickú kryštalografiiu, M. Dušek: Mikrofokální difraktometr ve Fyzikálním ústavu: dosavadní zkušenosti, zpracování dat v programu Jana 2006 a souvislosti s detailní strukturní analýzou, J. Rohlíček: Laboraťor práškovej difrakce na oddělení strukturní analýzy ve Fyzikálním ústavu AV ČR, v. v. i., E. Rakovský: Absence znalosti učebnic, 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. Čapková: Výzkumný servis v rámci výzkumné infrastruktury NanoEnviCz, P. Ryšánek: Strukturní analýza antibakteriálních filtračních médií, J. Novák: Růst a uspořádání nanočástic - viděno SAXSem. Z. Zápražný: Difrakčné povrchy krystalových monochromátorov pripravené pomocou nano-obrabania, E. Dobročka: Vyhodnocení hustoty threading dislokací v epitaxních vrstvách III-nitridů, P. Caha: 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 pri riešení textúr a štruktúr metódou EBSD, M. Čerňanský: 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 uhlíčitých anhydráz na bázi karboranů, P. Kolenko: Validace ligandů v makromolekulárních strukturách.

#### Komerční příspěvky:

B. Kinneging (Xplores): The Planet. Portable High-Resolution Powder Diffraction, D. Sisak 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. Míč (Měřicí technika Morava): Rtg zařízení firmy Bruker.



Struktura 2017, P. Oberta



M. Dušek



M. Čerňanský





M. Dudr



K. Trojan



I. Berková

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

### Sekce Materiály a fyzika:

J. Čapek: Reálná struktura feritické oceli a feritická fáze v duplexní oceli po válcování, P. Veřtát: Nová fáze v blízkosti martensitické transformace v Ni-Mn-Ga, M. Dudr: Rtg difrakce na slitině s vysokou entropií, K. Trojan: Reálná struktura a zbytková napětí v pokročilých svarech studovaná pomocí rentgenové a neutronové difrakce, M. Čurda: Poškození krystalové struktury galenitů radioaktivním zářením  $^{210}\text{Pb}$ , P. Cejpek: Příprava a studium struktury slitin  $\text{Ni}_2\text{MnGa}$  dopovaných In, J. Valenta: Nízko-templotní 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 antradithiophenu

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

### Sekce Biokrystalografie:

K. Rejžková: Krystalizace proteinu Tt81 z *Thermococcus thio-reducens*, P. Havlíčková: Krystalizační studie cukr-fosfatasy 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 komplexů 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 Ni(II) a TCNQ, P. Masárová: Strukturní a spektroskopické studium komplexů dipikolinátu, S. Matejová: Kryštalová struktura kokryštalův

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 Hradky

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 Hradky

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 Hradky,  
20. 6. - 27. 6. 2014

Na předchozích pět úspěšných ročníků FEBS pokročilých krystalizačních kurzů konaných v letech 2004, 2006, 2008, 2010 a 2012 navázal první ročník FEBS-INSTRUCT praktického krystalizačního kurzu pořádaného poslední červnový týden 2014. Na kurz přijalo pozvání 24 předních světových odborníků z oblasti proteinové krystalografie jako např. 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 pořádaná 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 Čech 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 místě kurzu v Laboratoři biomolekulární krystalogeneze a krystalografie. V rámci jednotýdenního pobytu byl zajištěn kromě vědeckého programu také kulturně-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 pořádaných 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). [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 a pokročilé metody izolace a čištění proteinů, nukleace, krystalové morfologie a růstové mechanismy, screening a optimalizace krystalizace s použitím standardních, pokročilých a alternativních technik, očkovací strategie, krystalizace membránových proteinů, krystalizace v mikrofluidních čípech, 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. Pět posterů bylo oceněno cenou - knihou Bernharda Rupp, dvěma knihami prof. Juan Manuel García-Ruize a dalšími dvěma knihami, které darovala Mezinárodní krystalografická unie IUCr. Ve foyer byla instalována výstava plakátů CRISTALES vytvořených ve Španělsku u příležitosti Mezinárodního roku krystalografie.

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

*Počet studentských účastníků:* 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 kursů:* Ivana Kutá Smatanová, Pavlína Řezáčová, Juan Manuel García-Ruiz

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

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

Přírodovědecká 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 Řezáčová (ÚOCHB AV

ČR, 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 přednesli přednášky a v odpoledním bloku praktických cvičení seznámili účastníky s použitím jejich přístrojů. V rámci třídenního symposia zaznělo 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 Českých 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 chemie a fyziky tuhých látek

### Development of Material Science i Research and Education

Hlavní akcí pořádanou Odbornou skupinou jsou konference/semináře *Development of Materials Science in Research and Education (DMSRE)*. První seminář se uskutečnil v roce 1990 v Gabčíkovu. Od té doby je organizuje *Odborná skupina chemie a fyziky tuhých látek* ve spolupráci Československou společností pro růst krystalů, střídavě na Slovensku a v České republice, obvykle začátkem září. Dalšími spoluorganizátory jsou Fakulta chemické a potravinářské technologie STU, Materiálovotechnologická fakulta STU, KS, Regionální komitét českých a slovenských krystalografů a Slovenská spoločnosť priemyselnej chémie.

V posledních letech se střídají dvě místa konference a to Pavlov v ČR (hotel IRIS) a Kežmarské Žlaby v SR.

Program semináře je tradičně věnovaný těmto základním problémům:

- Trendy rozvoje materiálových věd
- Výuka materiálových věd na vysokých školách
- Informace o projektech institucí
- Informace o nových zařízeních na přípravu a charakterizaci materiálů
- Výsledky vlastní výzkumné činnosti

Účast se pohybuje kolem 35-40 účastníků. Texty k přednáškám jsou tradičně publikované ve sborníku semináře s ISBN resp. v časopise *Journal CERAMICS - SILIKÁTY*.

Veškeré informace o činnosti OS CHFTL jsou na www stránce OS <http://oschftl.bts.sk>. o výše uvedených seminářích na stránkách Československé společnosti pro růst krystalů (CSACG) <http://csacg.fzu.cz/> resp. <https://dms.fzu.cz/>.



DMSRE27 v Kežmarských Žlaboch (2017)

## Vědecká rada Krystalografické společnosti 2013 2016

V tomto období pracovala rada ve složení: 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, Lubica Urbániková

### Volby nové vědecké rady

Na kolokviu Struktura 2016 v Táboře, dne 13. 9. byly ukončeny volby vědecké rady na další, tentokrát pětileté, období. Hlasování probíhalo před tím i korespondenčně. Volební komise ve složení, předseda: Pavel Vojtíšek (předseda), členové: Marian Čerňanský, Ivana Císařová porovnávala hlasovací obálky se seznamem Krystalografické společnosti (všechny hlasy odpovídaly členům společnosti, nikdo nehlasoval dvakrát). Komise rozlepila obálky, vyjmula lístky a zlikvidovala obálky, sečetla hlasy. Předseda komise pak zveřejnil pořadí prvních 13 kandidátů s nejvyšším počtem obdržených hlasů.

## Vědecká rada Krystalografické společnosti 2017 2021

RNDr. Petr Bezdička, CSc. (1959)

Ústav anorganické chemie  
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Jiří Brynda, CSc. (1962)

Ústav molekulární genetiky  
Akademie věd České 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 ČVUT, Praha

RNDr. Jindřich Hašek, DrSc. (1945)

Biotechnologický ústav,  
Akademie věd České republiky, v.v.i., Vestec

ing. Jiří Kulda, CSc. (1953)

Institute of Laue-Langevin  
Grenoble, France

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

Přírodovědecká fakulta, Jihočeská univerzita  
v Českých Budějovicích

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

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzita Karlova,  
Praha

doc. RNDr. Petr Mikulík, PhD (1969)

Přírodovědecká fakulta Masarykovy Univerzity,  
Brno

RNDr. Pavlína Malloy Řezáčová, Ph.D. (1974)

Ústav molekulární genetiky, Ústav organické chemie a  
biochemie, Akademie věd České republiky, v.v.i.,  
Praha





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

RNDr. Zbyněk Šourek, CSc. (1948)  
Fyzikální ústav  
Akademie věd České republiky, v.v.i., Praha

RNDr. Lubica Urbániková, CSc. (1960)  
Ústav molekulární biologie SAV, Bratislava

Nová vědecká rada na svém prvním zasedání zvolila funkcionáře Krystalografické společnosti.

### Redakce společnosti

Časopis společnosti vychází pod jménem “Materials Structure in Chemistry, Biology, Physics and Technology”, ISSN 1211-5894.

Vědecké články podléhají recenznímu řízení a jsou přijímány v angličtině, češtině či slovenštině. Redakční rada může zasláný příspěvek odmítnout, pokud se domnívá, že koncepčně nespadá do redakčního plánu. Články z časopisu jsou volně dostupné ve formátu PDF na adrese: <http://www.xray.cz/ms>. ických časopisů

### INTERNET

Adresa WWW serveru: <http://www.xray.cz>  
Prosíme o návrhy jak zlepšit náplň, formu a obsah. Například zasláním vhodných odkazů na vhodné WWW stránky.

### Grantové projekty

Společnost podpoří vhodné iniciativy a projekty prospěšné pro rozvoj krystalografie a oborů s ní souvisejících.

### Členství v Krystalografické společnosti

Registrace zájemců o činnost Krystalografické společnosti na [www.xray.cz](http://www.xray.cz) není spojena s povinností platit členský poplatek.

Plné členství ve Společnosti spojené s právem volit a být volen do vědecké rady a funkcí, a spolurozhodovat o záležitostech však žadatel získá až po zaplacení členského příspěvku v daném roce. Členský poplatek lze zaplatit buď společnou platbou s konferenčním poplatkem na konferencích pořádaných Krystalografickou společností (podrobnosti na [www](http://www.xray.cz) stránkách příslušné akce) nebo samostatnou platbou platební kartou či převodem.

Členský poplatek zahrnuje vložné a občerstvení na Rozhovorech (3-4 jednodenní semináře o strukturní analýze na různých místech ČR resp. SR), zaslání informačních materiálů a “Materials Structure in Chemistry, Biology, Physics and Technology” několikrát ročně. Členové rovněž mohou na Internetu inzerovat a také vyhledávat základní informace v databázích KS.

### Práva a výhody členů Společnosti:

možnost volit, být volen a účastnit se rozhodování o činnosti Společnosti a Regionálního komitétu IUCr;

možnost zúčastnit se konkurzu na poskytnutí stipendia na konferenci Společnosti a některé další akce na nichž se

Společnost podílí. Stipendium může udělit buď organizační výbor příslušné akce, nebo může účast na akci dotovat výbor Společnosti. Zpravidla se poskytují slevy vložného;

možnost podat vlastní výzkumný projekt grantové agentury prostřednictvím Krystalografické společnosti;

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

navrhnout zřízení a účastnit se aktivit specializovaných odborných skupin;

organizovat za pomoci Krystalografické společnosti seminář či konferenci specializovanou na vybrané téma;

sdužovat prostředky k zakoupení či pronájmu společně sdílených prostředků (např. pronájem databází);

organizovat prostřednictvím Krystalografické společnosti mnohostrannou spolupráci s právními subjekty v ČR, SR, případně v zahraničí;

podávat návrhy na udělení cen v oblasti krystalografie;

podávat prostřednictvím Společnosti návrhy na kandidáty do komisí IUCr, do ECA a ostatních mezinárodních organizací spolupracujících s Krystalografickou společností.

### Sekretariát společnosti

Činnost společnosti řídí sekretariát společnosti ve složení:

#### Předseda:

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

#### Místopředseda:

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

#### Místopředsedkyně:

doc. Ivana Kutá Smatanová, PhD  
Jihočeská univerzita  
v Českých Budějovicích  
Braníšovská 1760  
370 05 České Budějovice  
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 začleněn do Krystalografické společnosti (česká část). O příspěvek na členský poplatek IUCr je nadále žádána AV ČR.

doc. RNDr. Petr Mikulík, PhD (předseda)

Přírodovědecká fakulta

Masarykova univerzita v Brně

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

Katedra anorganické chemie, STU Bratislava

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

Přírodovědecká fakulta, Jihočeská univerzita

v Českých Budějovicích

doc. Ing. Lubomír Čaplovič, PhD.

Materiálovětechická fakulta, STU Trnava

prof. RNDr. Juraj Černák, CSc.

Přírodovědecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika,

Košice

doc. Ing. Ján Moncol, DrSc.

Katedra anorganické chemie, STU Bratislava

prof. Ing. Nikolaj Ganev, CSc.

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT Praha

*R. Kužel, J. Hašek*

komise pro mezinárodní krystalografické tabulky, dr. Lukáš Palatinus (FZÚ AVČR, 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 době 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. Maloy Řezáčová 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, výběr zvaných přednášek (plenárních a keynote) stejně jako výběr předsedů 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 schůze 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 AVČR, Praha) - komise pro magnetické struktury, ing. Bohdan Schneider (Biotechnologický ústav AV ČR, Praha) - biologické makromolekuly, dr. Petr Bezdička (Ústav anorganické chemie AV ČR, Řež u Prahy), komise pro umění a kulturní dědictví, dr. Michal Dušek (FZÚ AVČR, Praha) - komise pro aperiodické krystaly, komise pro krystalografickou nomenklaturu a

