



STRUKTURA 2018 - PROGRAMME

Monday, June 18

12:00	15:00	Registration		17:20	18:50	Session II	
14:45		Struktura 2018 - Opening					<i>N. Ganev, D. Šimek</i>
15:00	16:50	Session I		17:20			
			<i>P. Bezdička, F. Laufek</i>	L5			
				Jiří Čapek			164
				<i>(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)</i>			
				Srovnání zbytkových napětí určených různými metodami			
				Comparison of residual stresses determined by different methods			
15:00				17:45			
L1				L6			
Radomír Kužel			157	Karel Trojan			166
<i>(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)</i>				<i>(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)</i>			
Reálná struktura a total powder pattern fitting. MSTRUCT				Vliv pokročilého laserového opracování na mikrostrukturu			
Real structure and total powder pattern fitting. MSTRUCT				a zbytková napětí v nástrojových ocelích H13			
15:35				Effects of Advanced Laser Processing on the Microstructure and			
L2				Residual Stresses of H13 Tool Steel			
Petr Veřtát			162	18:10			
<i>(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)</i>				L7			
FitExc - program pro fitování difrakčních linií v MS Excel				Charles Hervochoes			166
FitExc - program for fitting of diffraction lines in MS Excel				<i>(Ústav jaderné fyziky AV ČR, Řež)</i>			
16:00				Characterization of residual stress distribution in structural			
L3				materials by neutron diffraction at CANAM infrastructure			
Kamil Poruba			162	18:35			
<i>(Fakulta elektrotechniky VUT Brno)</i>				L8			
Universální systém pro správu vzorků: vývoj rozsáhlé				Martin Černík, Peter Vranec			167
webové aplikace z hlediska vývojáře				<i>(U.S. Steel Košice)</i>			
Universal system for sample administration: development of ex-				Mikrostruktúra valcovaných TRIP a DP ocelí analyzova-			
tended web applications from the developer point of view				ných metodou RTG difrakcie a EBSD			
16:25				Structure Evaluation of Dual Phase Steels by EBSD Method			
L4				19:00			
Richard Pažout			163	Dinner			
<i>(VŠCHT Praha)</i>				20:00			
Substituční limity v novém minerálu staročeskéitu, Ag _{0.7}				cca 21:30			
Pb _{1.6} Bi _{1.35} Sb _{1.35} S ₆				Course MSTRUCT - Introduction, installation, tests			
Substitution limits in w new mineral staročeskéite, Ag _{0.7} Pb _{1.6}							
Bi _{1.35} Sb _{1.35} S ₆							
16:50							
<i>Coffee break</i>							

**Tuesday, June 19**

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:30 Session III

chair: *J. Maixner*

8:30

L9

169

František Laufek*(Česká geologická služba, Praha)*

Databáze anorganických struktur ICSD - Desktop

Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) – ICSD Desktop

9:05

L10

Radomír Kužel

170

(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)

Databáze práškových difrakčních dat - PDF-4+, fázová analýza

Powder Diffraction File – PDF4+, applications, phase analysis

9:40

L11

171

Pavel Roubíček*(České lupkové a uhelné závody, Nové Strašecí)*

Jednoduchý program pro kvantitativní fázovou analýzu

Simple program for quantitative phase analysis

10:05 *Coffee break*

10:30-12:10 Session IV

chair: *M. Pospíšil, M. Dopita*

10:30

L12

172

Jan Drahokoupil*(Fyzikální ústav AV ČR)*

Možnosti počítačových simulací

Possibilities of computer simulations

10:55

L13

173

Petr Ryšánek*(Přírodovědecká fakulta UJEP, Ústí nad Labem)*

Povrchová struktura chemicky modifikovaných polymerních nanovláken studovaná pomocí molekulového modelování

Surface structure of chemically modified polymeric nanofibers studied by molecular modelling

11:20

CL1

175

Heike Ehm*(Anton Paar)*

Cellulose nanocrystals - structural insights via 2D

q-mapping

11:45

CL2

176

Lukasz Sadowski*(Stoe)*

X-Ray Diffraction Systems – Technical advantages and Application Related Benefits

12:20 Lunch

13:45 15:25 Session V

chair: *J. Kulda, M. Dušek*

13:45

L14

151

Miroslav Pospíšil*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*Strukturní popis a vlastnosti vsrtevnatých Mg₂Al-hydroxidů interkalovaných fluvastatinem. Řešení pomocí molekulárních simulacíStructural description and properties of Mg₂Al-layered double hydroxides intercalated with the fluvastatin anions solved by molecular simulation methods

14:10

L15

176

Vasyl Ryukhtin*(Ústav jaderné fyziky AV ČR, Řež)*In-situ SANS study of precipitates nanostructure in single crystal Ti₁₅Mo

14:35

L16

177

Cynthia Antunes Correa*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*Incommensurately modulated crystal structures and phase transitions of Cu_{3+x}Si

15:00

L17

178

Elen Duverger-Nédellec*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*Transitions toward complex electronic states and aperiodic structures in P₄W₁₆O₅₆15:25 *Coffee break*

15:50 17:05 Session VI

chair: *L. Horák*

15:50

L18

180

Mojmír Meduňa*(Přírodovědecká fakulta MU Brno)*

Studium defektů v epitaxních SiGe gradovaných mikrokrystalech

Defect study in epitaxial SiGe graded microcrystal



16:15 L19 Petr Cejpek (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Stanovení obsahu fáze L21 a B2 ve slitinách Ni ₂ MnGa Determination of L21 and B2 phases contents in Ni ₂ MnGa alloys	181	10:00 <i>Coffee break</i> 10:30 12:40 Session VIII chair: Z. Šourek, R. Kužel
16:40 L20 Jaromír Kopeček (<i>Fyzikální ústav AV ČR Praha</i>) Rozbíjení bulků a spojování prášků v systému Fe-Al-Si Breaking bulks and binding powders in Fe-Al-Si system	182	10:30 CL3 Jan Gertenbach (<i>Malvern Panalytical</i>) News in XRD Epyrean
17:10 MSTRUCT course, Examples 1		10:55 CL4 Andreas Stricker (<i>Incoatec</i>) New developments in microfocus sources for X-ray diffractometry
19:00 Dinner		11:20 CL5 Boris Míč (<i>Měřicí technika Morava</i>) Nové detektory firmy Bruker New Bruker detectors
20:15 Meeting of the scientific board of Czech and Slovak Crystallographic Association and IUCr Regional Committee of the Czech and Slovak Crystallographers		11:45 L24 Michal Čurda (<i>Přírodovědecká fakulta UK Praha</i>) Zkušenosti s provozem rtg práškového difraktometru Bruker D8 Advance: Automatická divergenční clona, „variable counting time“ metoda měření Experience with powder X-ray diffractometer Bruker D8 Advance: Automatic divergence slit, variable counting time data collection
Wednesday, June 20		
7:30 8:30 Breakfast		189
8:30 10:10 Session VII chair: P. Vojtíšek		
8:30 L21 Jindřich Hašek (<i>Biotechnologický ústav AV ČR, BIOCEV, Vestec</i>) Novinky v CCDC What's new in CCDC	182	
9:00 L22 Jan Rohlíček (<i>Fyzikální ústav AV ČR Praha</i>) Porovnávání solvátů organických látek programem CrystalCMP Comparison of solvates of organic compounds by the program CrystalCMP	184	12:40 Lunch
9:25 L23 Michal Hušák (<i>VČHT Praha</i>) Pokrok v řešení složitých struktur molekulárních krystalů z práškových difrakčních dat	187	13:50 Program DASH, short course
		17:00 MSTRUCT course, Examples 2
		19:00 Assembly of the CSCA members
		20:00 Dinner
		21:00 Meeting of the scientific board of Czech and Slovak Crystallographic Association and IUCr Regional Committee of the Czech and Slovak Crystallographers

**Thursday, June 21**

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:10 Session IX

chair: *P. Mikulík*

8:30

L25

190

Michal Dušek*(Fyzikální ústav AV ČR Praha)*

Jana2020 - první dětské krůčky nástupce programu

Jana2006

ExJana2020 - first kid steps of follower of Jana2006 program

9:05

L26

Zdeněk Matěj*(MAX IV Laboratory, Lund University, Lund, Sweden)*

Přehled programů pro metody inverzní rtg. mikroskopie

Review of programs for methods of inverse X-ray microscopy

9:40

CL6

Peter Oberta*(Rigaku Innovative Technologies Prague)*

Nový Rigaku XRD SmartLab XE

10:10 *Coffee break*

10:40 13:10

chair: *P. Malloy Řeáčová, J. Dohnálek*

10:40

L27

191

Jiří Brynda*(Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha)*

Řešení proteinových struktur programem

ARCIMBOLDO

Solution of protein structures with

programARCHIMBOLDO

11:05

L28

191

Jindřich Hašek*(Biotechnologický ústav AV ČR - BIOCEV, Vestec)*

Porézní katalyzátory proteinové krystalizace

Porous catalysts of protein crystallization

11:30

L30

192

Martin Marek*(Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity Brno)*

Krystalografická studia komplexů inhibitorů HDAC8

Crystallographic studies of HDAC8-inhibitor complexes

11:55

L31

193

Ivana Berková*(Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice)*

Krystalizační studia nové haloalkan dehalogenasy DgaA

z *Glacieocola agarylitica* NO2

Structural studies of novel haloalkane dehalogenase DgaA from

Glacieocola agarylitica NO2

12:15

L32

193

Petra Havlíčková*(Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice)*

Krystalografická studia nově připravené histidinol–fosfát

fosfatasy Tt82 z *Thermococcus onnurineus*

Crystallographic studies of a newly prepared histidinol–phos-

phate phosphatase Tt82 from *Thermococcus onnurineus*

12:35

L33

194

Kristýna Rejžková*(Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice)*

Validace ligandů v makromolekulárních strukturách

Ligand validation in macromolecular structures

12:55 Closing remarks

13.00 Lunch