



STRUKTURA 2019 - PROGRAMME

Monday, June 10

11:00 13:30 Registration

13:45 Struktura 2019 - Opening

16:30 18:10 Session II

14:00 16:05 Session I

M. Pospíšil, J. Moncol'

P. Bezdička, F. Laufek

14:00

L1

Zdeněk Matěj

(MAX IV Lund, Sweden)

Crystallographic software on malleable hardware

131

16:30

L6

Michal Hušák

(VŠCHT Praha)

Využití DFT výpočtů pro lokalizaci vodíků v rámci řešení struktury z prášku

The use of DFT calculation for salt-cocystal distinguishing

136

14:30

L2

Jiří Hybler

(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)

Co je nového v polytypismu cronstedtite

What's new in the polytypism of cronstedtite

132

16:55

L7

Jan Rohlíček

(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)

Studium desolvatace organických látek

Study of desolvation of organic compounds

137

14:55

L3

Michal Čurda

(Česká geologická služba, Přírodovědecká fakulta UK)

Mineralogická analýza vzorků z ložiskové prospekce v ČR pomocí rtg práškové difrakce

Application of powder X-ray diffraction for heavy mineral

prospection in the Czech Republic

133

17:20

L8

Juraj Černák

(Ústav jaderné fyziky AV ČR, Řež)

Solvatomorfizmm komplexov niklu(II) s ligandy typu salen

Solvatomorphism of nickel(II) complex with salen-type ligand

138

15:20

L4

Elen Duverger Nedellec

(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)

Crenel or not crenel: what is the function?

134

17:45

Radomír Kužel, Ivana Kutá Smatanová

25. kongres IUCr v Praze, CTFC workshop a schůze

mezinárodního programového výboru

25th IUCr congress in Prague. CTFC workshop and IPC meeting

176

15:45

L5

Adrien Chauvin

(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)

Structural analysis of nanoporous gold obtain by dealloying

134

18:10 Discussion

19:15 Dinner

16:05 *Coffee break*

20:00

Discussion

**Tuesday, June 11**

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:00 Session III

chair: *J. Černák, P. Vojtíšek*

8:30

L9

139

Erik Rakovský*(Přirodovedecká fakulta UK Bratislava)*

Praktická výuka chemické kryštalografie s využitím Olex2

Hands-on chemical crystallography course using Olex2

8:55

L10

Ján Moncol

139

(Fakulta chemické a potravinárskej technológie STU Bratislava)

Využitie programových balíkov CSD databázy pri výuke študentov v rámci predmetu Laboratórium difrakčných metód

Use of program packages in CSD database for teaching

9:20

CL1

Radomír Kužel*(Matematicko-fyzikálna fakulta UK, Praha)*

New Crystal Maker X for crystal structure visualization, simulation of diffraction patterns.

9:40

CL2

Peter Oberta*(Rigaku)*

Rigaku News 2019

10:00 *Coffee break*

10:30-12:40 Student session I

chair: *J. Hašek, J. Brynda*

10:30

SL1

162

Barbora Kaščáková*(Přirodovedecká fakulta JČU České Budějovice)*

Molekulárně biologická a strukturální studie virových proteinů

Avian orthoreovirus protein - molecular biological studies

10:50

SL2

163

Anastasiia Shaposhnikova*(Přirodovedecká fakulta JČU České Budějovice)*

Experimental and computational investigations of the human system PAPSSynthase

11:20

SL3

163

Petra Havlíčková*(Přirodovedecká fakulta JČU České Budějovice)*Strukturální a funkční studia HAD fosfatázy Tt82 z *Thermococcus thio-reducens*Structural and functional studies of HAD phosphatase Tt82 from *Thermococcus thio-reducens*

11:40

SL4

164

Andrii Mazur*(Přirodovedecká fakulta JČU České Budějovice)*Preliminary crystal structure analysis of serpin 4 from tick *Ixodes ricinus*

12:00

SL5

164

Filip Melicher*(Středoevropský technologický institut, MU Brno)*Strukturální charakterizace lektinů z rodu *Photorhabdus asymbiotica*Structural insight into lectins from *Photorhabdus asymbiotica*

12:20

SL6

165

Martin Malý*(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)*

Optimalizace výpočetních procedur makromolekulární krystalografie

Estimation of diffraction limit using paired refinement

12:45 Lunch

14:00 15:40 Student session II

chair: *D. Šimek, M. Dopita*

14:00

SL7

Karel Trojan

166

(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)

Studium reálné struktury laserových návarů ocelí

Study of the real structure of the laser-cladded steel

14:20

SL8

Petr Veřtát

167

*(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)*Tepelně indukované změny v modulované struktuře 10M Ni₅₀Mn₂₇Ga₂₂Fe₁ martenzituThermally induced changes in modulated structure of 10M Ni₅₀Mn₂₇Ga₂₂Fe₁ martensite



14:40 SL9 Jiří Čapek (<i>Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha</i>) Srovnání válcovacích textur dvojfázových a jednofázových ocelí Comparison of the rolling texture of particular phases of dual-phase steel with single-phase steels	169	17:10 SL15 Petr Doležal (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Bound state of crystal electric field excitation and a phonon in CePd ₂ Al ₂	175
15:00 SL10 Miroslav Lebeda (<i>Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha</i>) Krystalová struktura a vlastnosti SrTi _{1-x} Mn _x O ₃ perovskitu - od výpočtů k experimentům Crystal structure and properties of SrTi _{1-x} Mn _x O ₃ perovskites – from calculations to experiments	170	18:00 Discussions	
15:20 SL11 Tomáš Číž (<i>Přírodovědecká fakulta MU, Brno</i>) Strukturální studia perovskitových tenkých vrstev a multivrstev Structural analysis of perovskite thin films and multilayers	171	19:00 Dinner	
15:40 <i>Coffee break</i>		20:15 Meeting of the scientific board of Czech and Slovak Crystallographic Association and IUCr Regional Commit- tee of the Czech and Slovak Crystallographers	
16:10 18:00 Student session III chair: <i>E. Dobročka, P. Čápková</i>		Wednesday, June 12	
16:10 SL12 Tereza Kretková (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Thermal evolution and microstructure of gas aggregation cluster source produced metal nanoparticles	172	7:30 8:30 Breakfast	
16:30 SL13 Milan Pšenička (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Strukturální analýza podvojných vrstevnatých hydroxidů interkalovaných léčivými metodami klasické molekulární dynamiky a DFT Structural analysis of clay minerals intercalated with drugs solved by classical molecular dynamics and DFT methods	173	8:30 10:45 Session IV chair: <i>B. Schneider, N. Ganev</i>	
16:50 SL14 Jakub Škoda (<i>Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha</i>) Study of arrangement of intercalated organic species within layered materials by molecular simulation methods	174	8:30 L11 Jindřich Hašek (<i>Biotechnologický ústav AV ČR, BIOCEV, Vestec</i>) Princip dominantního adhezivního módu vysvětluje proč porezní materiály zlepšují krystalizaci biologických makromolekul Principle of dominant adhesive mode explains why porous mate- rials improve crystallization of biological macromolecules	141
		8:55 L12 Ivana Kutá Smatanová (<i>Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice</i>) Rozdíly v krystalizaci halogenalkan dehalogenas Differences in crystallization of various haloalkane dehalo- genases	142
		9:15 L13 Jiří Brynda (<i>Ústav organické chemie a biochemie AVČR, Praha</i>) Orientované vlastnosti fluorogenních kofaktorů v kontextu krystalové struktury Directionality of dipoles of fluoregen cofactors in context of crys- tal structure	142
		9:35 L14 Petr Kolenko (<i>Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha</i>) Vývoj software pro makromolekulární krystalografii Software Development for Macromolecular Crystallography	143



9:55 L15 Jan Stránský (<i>Biotechnologický ústav AV ČR BIOCEV, Vestec</i>) Maloúhlový rtg rozptyl na biologických vzorcích s užitím laboratorních zdrojů Small angle X-ray scattering of biological samples with laboratory equipment in BIOCEV	143	14:30 Discussion	
		15:30 <i>Coffee Break</i>	
		16:15 18:15 Session VI	chair: Z. Šourek, P. Mikulík
10:15 CL3 P. M. Worsch (<i>Anton Paar</i>) Rheology and SAXS in one go with a laboratory SAXS system - method and applications	144	16:15 L16 Matej Jergel (<i>Fyzikálny ústav SAV Bratislava</i>) Pentacen na grafenu studovaný pomocí in-situ GISAXS a GIWAXS Pentacen growth on graphene studied by in situ GISAXS and GIWAXS	145
10:40 <i>Coffee break</i>		16:40 L17 Edmund Dobročka (<i>Elektrotechnický ústav SAV Bratislava</i>) Rtg difrakčná analýza epitaxných vrstiev s hĺbkovo závislým zložením X-ray diffraction analysis of epitaxial layers with depth-dependent composition	148
11:10 13:00 Session V	chair: R. Kužel	17:05 L18 Ondřej Caha (<i>Přírodovědecká fakulta MU Brno</i>) Home assembled X-ray instrumentation: rocking curve imaging, standing wave fluorescence	151
11:10 CL4 Boris Míč (<i>Měřicí technika Morava</i>) Novinky firmy Bruker Bruker news		17:30 L19 Tomáš Roch (<i>Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK v Bratislave</i>) Vliv substrátu na přednostní orientaci vrstev NbN Impact of substrate on preferential orientation of NbN thin layers	152
11:30 CL5 Jaroslav Maixner (<i>VŠCHT Praha</i>) New developments in microfocus sources for X-ray diffractometry		17:55 L20 Esther de Prado (<i>Fyzikální ústav AVČR</i>) Hybrid multiple diffraction	153
11:50 CL6 Stjepan Prugovečki (<i>Malvern Panalytical</i>) Panalytical news			
12:10 Jiří Kulda (<i>ILL Grenoble</i>) Naše členství v ILL Our membership in ILL			
12:25 Petr Mikulík (<i>Přírodovědecká fakulta MU, Brno</i>) ESUO - European Synchrotron User Organisation		18.30 CSCA Assembly	
13:00 Lunch		20:00 Dinner	

**Thursday, June 13**

7:30 8:30 Breakfast

8:30 10:10 Session VII

chair: *Z. Matěj, J. Maixner*

8:30

L21

155

Jiří Kulda*(ILL Grenoble)*

Co se skrývá v pozadí braggovské difrakce aneb Difuzní rozptyl a PDF analýza, nejen s neutrony

What is hidden in the background of Bragg diffraction. Diffuse scattering and PDF analysis not only with neutrons

9:00

L22

155

Petr Bezdička*(Ústav anorganické chemie AV ČR)*

Kolik tam toho je? Aneb těžkosti kvantitativní fázové analýzy

How much is in there? Or, the difficulties and issues surrounding the quantitative phase analysis

9:25

L23

156

Josef Kašlík*(Přírodovědecká fakulta UP Olomouc)*

Využití vysokoteplotní RTG práškové difrakce pro studium přípravy materiálů využitelných v environmentálních aplikacích

Utilization of high temperature X-ray powder diffraction for study of preparation of nanomaterials for environmental applications

9:50

L24

157

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

Krystalizace polymerních nanovláken v nanospideru

Crystallization of polymer nanofibers in nanospider

10:15 *Coffee break*

10:45-12:15

chair: *L. Horák, D. Šimek*

10:45

L25

157

Jaromír Kopeček*(Fyzikální ústav AVČR)*Spark plasma sintered alloys FeAl₂₀Si₂₀ with ternary additions - microstructure and phase composition

11:10

L26

158

Marian Čerňanský*(Fyzikální ústav AVČR)*

Velikost částic a poloha difrakčních linií

Crystallite size and position of diffraction lines

11:35

L27

160

Jan Drahokoupil*(Fyzikální ústav AVČR)*

Iontová implantace titanových slitin

Iont implantation of titanium alloys

12:00 Closing remarks

12.10 Lunch