

**STRUKTURA 2020 - PROGRAMME****Wednesday, November 25**

9:45 Struktura 2020 - Opening

10:00 16:05 Session I

R. Kužel

L1
Jindřich Hašek 73
(*Biotechnologický ústav AV ČR, Vestec*)
Database of organic and inorganic structures

L2
Lukáš Palatinus 74
(*Fyzikální ústav AV ČR, Praha*)
Lattice parameters from electron diffraction: vain(?) struggle against image distortions

Jan Gertenbach 100
(*Malvern Panalytical*)
The 1Der detector for Empyrean X-ray Diffraction

11:30 12:30 Session II

F. Laufek

L3 75
Jan Drahokoupil
(*Fyzikální ústav AV ČR, Praha*)
Crystal structure prediction

L4 77
Jiří Hybler
(*Fyzikální ústav AV ČR, Praha*)
Subfamily D non-MDO six-layer polytypes of crosstedtite

13:30 15:15 Session III **Synchrotron radiation***P. Oberta, Z. Šourek*

L5 79
Uwe Müller
(*Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Berlin*)
X-ray diffraction structural biology using synchrotron radiation

L6 79
Rajmund Mokso
(*Fyzikální ústav AV ČR, Praha*)

A short overview of tomographic imaging capabilities at synchrotrons in Europe and elsewhere

L7 79
Jozef Bednarčík
(*P.J. Šafárik University in Košice*)
Application of pair distribution function for study of highly-disordered compounds

L8 80
Václav Holý
(*Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha*)
In-situ x-ray scattering study of pulsed-laser deposition of

L9 80
Zdeněk Matěj
(*MAX IV Laboratory, Lund University*)
Future data analysis services at European and national photon and neutron facilities

L10 80
Jana Šmilauerová
(*Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha*)
Phase transformations in Ti-15Mo single crystal investigated by synchrotron X-ray diffraction

L11 81
Sanja Burazer
(*Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha*)
Temperature induced structural evolution of porous imidazolate compounds via synchrotron XRPD

L12 82
Peter Oberta
(*Fyzikální ústav AV ČR, Praha*)
ESRF Czech membership

17:30 Posters

Petr Ryšánek 100
(*Přírodovědecká fakulta UJEP, Ústí nad Labem*)
Influence of internal structure on properties and morphology of nanofiber textiles

Petr Pachtl 101
(*Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha*)
Rutinosidase – labyrinthine journey for x-ray structure



Thursday, November 26

9:30 10:30 Session III

chair: *P. Kolenko*

L13 85
Michal Dušek
(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)
 Jana2020, a new version of the crystallographic computing system

L10 86
Jan Rohlíček
(Fakulta chemické a potravinářské technologie STU Bratislava)
 Examples of applications of program CRYSTALCAMP for comparison of packing of molecular crystals

10:45-12:40 Student session I

chair: *M. Dopita, D. Šimek*

SL1 106
Petr Cejpek
(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)
 Phase diagram and temperature evolution of structure and modulation of Ni₂MnGa_{1-x}In_x single crystals

SL2 106
Petr Doležal
(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)
 CePt₂Al₂ - structural properties

SL3 107
Petr Veřtát
(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)
 The All-New FitExc: MS Excel-based Diffraction Profile Fitting Program (COVID Lockdown Edition)

SL4 108
Karel Trojan
(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)
 Study of real structure of laser-welded tool steel

SL5 109
Tereza Košutová
(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)
 Thermal evolution and microstructure of gas aggregation cluster source produced metal nanoparticles

13:30-16:30 Student session II

chair: *P. Řezáčová, I. Kutá Smatanová*

SL6 110
Martin Malý
(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)
 Application of paired refinement in fragment-screening project

SL7 111
Stefan Djukic
(Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha)
 Structural studies of purine nucleoside phosphorylase inhibitors

SL8 112
Anastasiia Shaposhnikova
(Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice)
 Experimental and computational investigations of the haloalkane dehalogenases and their interactions with ionic liquids

SL9 112
Petra Havlíčková
(Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice)
 Production of TBEV NS5 protein for structural studies

SL10 113
Barbora Kašćáková
(Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice)
 Structure Comparison of Salivary Serpins from *Ixodes ricinus*

SL11 114
A. Kravic
(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)
 X-ray diffraction analysis of flavin-dependent oxidase from thermophil *Chaetomium thermophilum*

SL12 114
Kristýna Adámková
(Biotechnologický ústav AV ČR, Vestec)
 Atomic resolution structures of S1 nuclease complexes reveal details of RNA interaction with enzyme in spite of unusual crystal defect

16:45 18:00 Session IV

L11 88
Radomír Kužel
(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)
 Online výuka krystalografie a difrakce v MS Teams, včetně "praktické" výuky (vyhodnocování) - poznámky a praktické příklady z MFF UK
 Teaching crystallography online with MS Teams – comments, examples

Discussion

Friday, November 27

9:30 10:45 Session IV

chair: *J. Brynda*

L16 89

Petr Kolenko*(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)*
baSHELixir has new features and new GUI

L17 90

Tatyana Prudnikova*(Přírodovědecká fakulta JČU České Budějovice)*
The crystal structure of the first haloalkane dehalogenase tetramer

L18 90

Jan Stránský*(Biotechnologický ústav AV ČR BIOCEV, Vestec)*
Advanced biological applications of SAXS in-house

11:10 12:30 Session V

chair: *M. Dopita*

L19 91

AnnaFučíková*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*
Introduction to nanotechnology

L20 91

Pavel Strunz*(Ústav jaderné fyziky AV ČR, Řež)*
Structure and microstructure of rotary-swaged W-Ni-Co pseudoalloy studied by neutron diffraction

L21 92

Alexander Zhigunov*(Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Praha)*
On optimization of magnetic nanoparticles arrangement in PS-*b*-P4VP block copolymer thin films

L22

Adrien Chauvin 93*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*

Sputtering onto liquids: the behaviour of nanoparticles under thermal annealing

13:00 15:30 Session VI

chair: *M. Dopita*

L23 94

Esther de Prado*(Fyzikální ústav AVČR)*
Microstructure analysis in AlMnCu samples

L24 95

Monika Kučeráková*(Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT, Praha)*
X-ray diffraction study of the preferred orientation of Sinanodonta woodiana shells

L25 96

Jaromír Kopeček*(Fyzikální ústav AV ČR, Praha)*
Structure of aluminothermy reduced deep-sea nodules

L26 97

Evgenia Tereshina Chitrova*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*
Coupling between magnetism and crystal structure in the antiferromagnetic UO₂

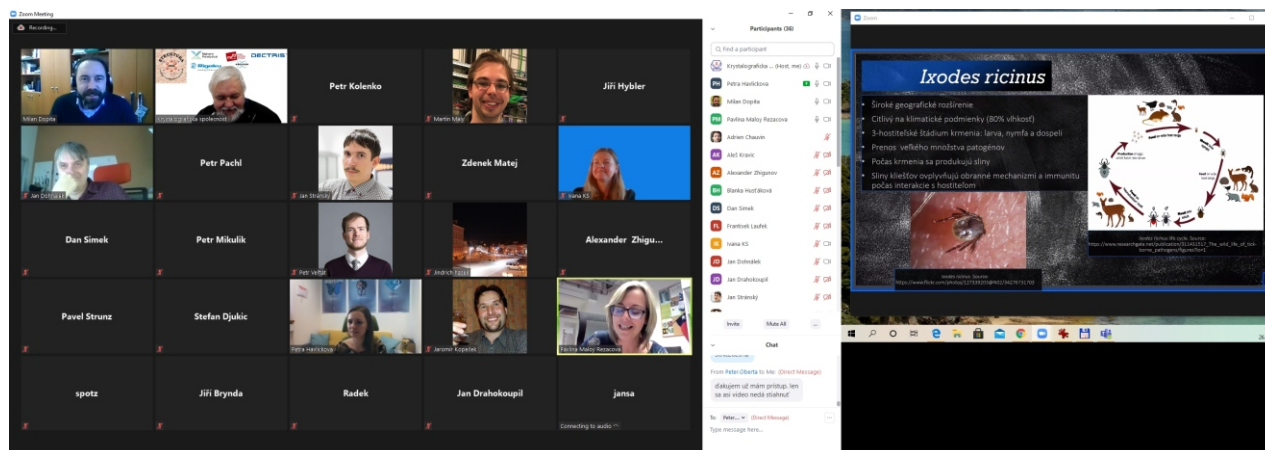
L27 97

Radomír Kužel*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*
XRD study of strongly oriented thin films of hexagonal ferrites with potential magnetoelectric effect

L28 98

Lukáš Horák*(Matematicko-fyzikální fakulta UK, Praha)*
Texture analysis of strongly oriented layers utilizing Fast Reciprocal Space Mapping

16:00 Results of student competition, closing



Screen copy instead of usual photos of participants