



Session III, Tuesday, May 30

L10

ODDĚLENÍ STRUKTURNÍ ANALÝZY VE FYZIKÁLNÍM ÚSTAVU

M. Dušek

*Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Czech Republic
dusek@fzu.cz*

Abstract

The Department of Structure Analysis at the Institute of Physics specializes in developing crystallographic methods for aperiodic structures, structure analysis from electron diffraction, and some aspects of powder diffraction. In addition, we perform X-ray and electron diffraction experiments and practical structure analysis. This paper shows how the Department of Structure Analysis developed since 2010, when a summary article [1] on the occasion of the Colloquium in Soláň was published. The article mentioned above describes the department's history, which has been operating without interruption for more than 70 years, and captures the beginnings of building a modern instrumentation base for X-ray and electron diffraction. At that time, we did not yet know that the world crystallography was about to undergo an electron boom, but by the control of fate, which - in retrospect - we call foresight, we were already in the right boat.

Elektronová difrakce

Lukáš Palatinus byl v roce 2010 známý jako autor úspěšného programu Superflip [2], ale po návratu z dlouhodobého pobytu v zahraničí se rozhodl věnovat novému nadějněmu oboru, elektronové difrakci na nanokrystalech. Ačkoli GAČR manifestovala svoji systémovou neschopnost rozpoznat slibné projekty tím, že Lukášovi mnoho let neudělovala žádné projekty, plán to překazit nemohlo. V krystalografii totiž víme, že si musíme pomáhat, takže počátky výzkumu elektronové difrakce v našem oddělení byly financovány z Akademické prémie Václava Petříčka, kterou získal za vývoj programu Jana.

Cílem Lukášova výzkumu bylo, aby z dat elektronové difrakce bylo možné spočítat struktury s přesností, která by se blížila strukturám určeným z rentgenu. K tomu bylo potřeba koupit prastarý TEM, kde držák vzorku umožňoval velké natočení (tilt), a moderní nástavec pro aplikaci precizní metody, vytvořit z této sestavy Elektronový difraktometr pomocí programů pro automatický sběr a vyhodnocení dat, a nakonec vyvinout výpočetní metody, které umožní aplikovat dynamickou teorii difrakce. Světový úspěch se dostavil v roce 2017, kdy se Lukášův tým dostal na titulní stránku Science s článkem o upřesnění polohy vodíku z elektronové difrakce [3], a pokračoval publikací v téže časopise v roce 2019 [4], kdy se podařilo z elektronové difrakce spočítat absolutní strukturu. Tím se také prolomily ledy na straně grantové agentury, která začala Lukášovy projekty přijímat, čímž se dotčený stal sponzorem RTG krystalografie, která naopak upadla v nemilost.

Elektronová difrakce se v současné době na našem pracovišti měří a zpracovává programem PETS [5], který je i komerčně zajímavý, a proto jeho uživatelské rozhraní je moderní a vstřícné. Data pak přebírá dvojice programů Jana2020 [6] a Dyngo [7], kde Jana dělá obvyklou krystalografickou práci, tedy upřesňuje a interpretuje, zatímco Dyngo jí dodává dynamické intenzity, jejich derivace a další parametry. Právě Dyngo je nejunikátnější součástí celého procesu, nebo zatím nikdo další podobný výpočetní nástroj nenabízí.

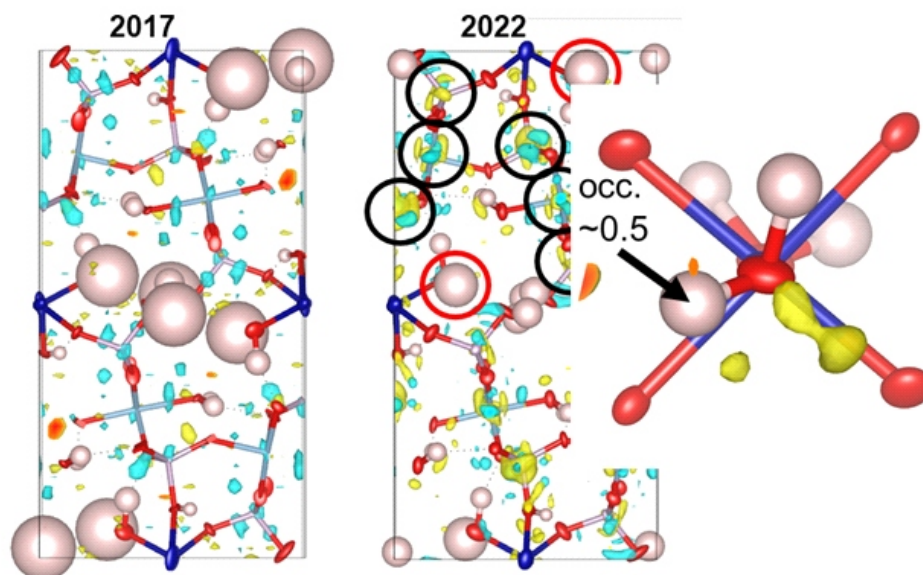
Elektronové difrakci se nyní věnuje velký tým, ze kterého je třeba jmenovat alespoň Petra Brázdu a Marianu Klementovou, kteří byli u všech výše uvedených zásadních kroků. Rozvoj strukturní analýzy z elektronové difrakce nyní pokračuje „nudnou fází“, kdy existující postupy jsou dále zdokonalovány. Jak důležitá tato fáze je ukazuje obr. 1, kde je ta samá struktura řešena v roce 2017 a o pět let později. V roce 2017 se podařilo určit polohy vodíků, zatímco v roce 2022 bylo již k rozpoznání, že vodíky jsou rozděleny mezi dvě polohy v důsledku disorderu molekuly vody.

Přístrojové vybavení

V roce 2014 jsme získali projekt OPPK, kde Praha financovala vše od sazenic kedluben až po strukturní analýzu, a oddělení strukturní analýzy tím získalo finanční injekci 40 mil. Kč, což pro relativně finančně nenáročný obor znamenalo kompletní modernizaci od sklepa po půdu. Následoval Národní projekt udržitelnosti NPU I, který po pět let financoval provoz našeho oddělení s ušlechtilými sociálně-inženýrskými cíli, které jsme sice nikdy nedokázali plně pochopit, ale beze zbytku jsme je naplnili. Od roku 2015 oddělení disponuje dvěma monokrystalovými difraktometry (SuperNova a Gemini), dvěma práškovými difraktometry (Empyrean a Smartlab), transmisním elektronovým mikroskopem TECNAI G2 20 a vybavením pro přípravu mikroskopických vzorků.

Program Jana2020 a magnetické struktury

V letošním roce byl po dlouhých odkladech způsobených bouřlivým vývojem zveřejněn článek [6] o nové verzi programu Jana, Jana2020. Tento program byl ve skutečnosti k dispozici již v roce 2020, ale nešlo jej citovat. Jana2020 má zcela předělané grafické rozhraní, které již nespolehá na podomácku vyrobené grafické funkce, ale volá objekty poskytované knihovnou Winteracter. Hlavní inovací, které si všimne každý uživatel, je interaktivní kreslicí program, který ukazuje změny struktury během upřesnění a který umožňuje editovat strukturní parametry a volat vybrané nástroje. Tento plotter kreslí i modulované



Obrázek 1. Strukturální analýza látky $\text{Co}_{1.13}\text{Al}_2\text{P}_4\text{O}_{20}\text{H}_{11.74}$. (vlevo) upřesnění na základě kombinace dat ze šesti vzorků ukazuje vodíkové atomy; (vpravo) upřesnění na základě jednoho z dříve použitých data setů ukazuje disorder molekuly vody. Metoda je popsána v článku [8].

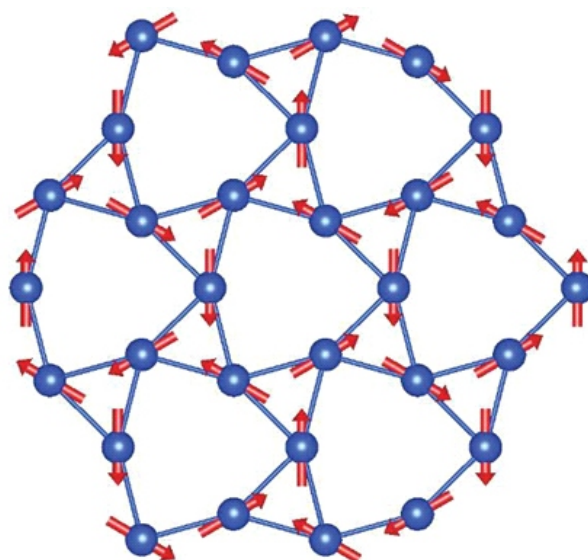
struktury a dovede vytvořit populární „animace“, tj. po sobě následující trojrozměrné řezy definované souřadnicí t .

Vývoj programu byl po tři roky podporován grantovou agenturou, ale ve skutečnosti byl mnohem delší, protože bylo potřeba přeprogramovat stovky formulářů do nového grafického prostředí, které sice je profesionální, ale hůře přizpůsobitelné reálným potřebám. Dalším náročným procesem, který stále ještě probíhá, bylo rozhodnout, které nástroje je účelné volat z kreslicího programu a které je výhodné i nadále ovládat pouze manuálně. Program Jana2020 je nyní ve stavu, kdy ve všech ohledech předčí předešlou verzi Jana2006. Je to patrně i názor mnohých uživatelů, protože na odkazu <https://jana-login.fzu.cz>, který jsme zveřejnili teprve před měsícem v publikaci [6], bylo před zveřejněním zaregistrováno přes 3000 uživatelů, kteří si možnost registrace vypátrali sami.

Program Jana2020 obsahuje vše, co bylo v programu Jana2006, ale nástroje prošly revizí a rozšířením. Hlavní vývoj programu se ale odehrává v oblasti magnetických struktur, nebo to je další obor vedle elektronové difrakce, kde je stále ještě co vyvíjet. Unikátnost programu Jana2020 spočívá v tom, že kombinuje využití analýzy reprezentací s využitím magnetických prostorových a superprostorových grup. Uživatel má přitom k dispozici vše, co bylo v programu vyvinuto pro strandární a modulované struktury, takže je například možné počítat látky, ve kterých je modulovaná jak magnetická, tak i nukleární struktura [9]. Hezký příklad aplikace programu Jana na frustrovanou magnetickou strukturu je vidět na Obr. 2.

Další témata

Oddělení strukturální analýzy má dlouholetou tradici mineralogickou, která je zosobněna Jiřím Hyblerem a jeho pracemi o strukturách minerálu cronstedtite (deset prací od roku 2006). Na tuto tradici navázal Jakub Plášil, který je v současnosti světově známým expertem na minerály uranu a autorem objevu devadesáti nových minerálů. Velkým úspěchem bylo publikování extrémně složité



Obrázek 2. Magnetické momenty upřesněné programem Jana v intermetalické struktuře HoAgGe s frustrovaným planárním uspořádáním magnetických momentů.

struktury minerálu ewingite s uranylkarbonátovými klecemi, který se objevil na titulní stránce časopisu *Geology* [11]. V poslední době se na mineralogickém výzkumu podílí také Gwladys Steciuk, odbornice na strukturální analýzu z elektronové difrakce, nebo elektronová difrakce zpřístupnila pro strukturální analýzu řadu dosud neměřitelných minerálů.

Velmi úspěšná je RTG strukturální analýza z prášků, kde Laboratoř práškové difrakce vede Jan Rohlíček. Honza kráčí v tradicích našeho oddělení, takže nejen řeší krystalové struktury, ale podílí se také na vývoji metodik – spolupracoval na vývoji programu FOX a Marching Cube, vytvořil program CMP pro porovnávání krystalových struktur [12] a v poslední době se věnuje experimentům *in situ*. Oddělení dále provádí analýzu monokrystalových



struktur, a to v rámci široké globální spolupráce, kde měříme vše od soli kamenné po komplikované modulované struktury. Oporou týmu je hyperaktivní Václav Eigner, Monika Kučeráková a Morgane Poupon. Struktury, které nejde vyřešit, končí jako vždy dříve na počítači Václava Petříčka.

Wolfgang Hornfeck sleduje naše snažení z nadčasové perspektivy matematické krystalografie. Jeho tématem jsou strukturní deskriptory, které mají za úkol odhalit souvislosti mezi strukturou a vlastnostmi na základě sofistikovaného, ale čistě popisného, hlediska. Wolfgang je jedním z několika málo lidí, kteří se ve světě touto problematikou zabývají. Vhled do problematiky lze najít například v práci [13].

Jak dál?

Provozovat oddělení krystalografie bylo naposledy koncepčně snadné v 50. letech, kdy se jednalo o průkopnický obor všeobecně uznávaný za vědu. Od té doby se periodicky objevují názory, že krystalografie je jen soubor dávno definovaných technických postupů, které má provádět vyškolený personál pro nějaký, nejlépe chemický, ústav. Před rokem 1989 tyto názory nebyly pro krystalografii u nás nebezpečné, protože ústavy Akademie věd prováděly výzkum bez peněz, a kde nejsou peníze, není ani soutěž o finanční prostředky. Drama začalo s rozvojem grantových podpor, kdy najednou stačilo říct, že toto není věda, a finanční prostředky přesměrovat na „perspektivní obory“.

Udržet krystalografii jako vědu znamená získat do týmu každých 15 let někoho, kdo to dovede dokázat. V 90. letech to byl Václav Petříček s modulovanými strukturami, nyní je to Lukáš Palatinus s elektronovou difrakcí. Problém je, že tyto osobnosti nelze do Akademie přilákat finančně a technologicky atraktivní nabídkou, takže se spíše jedná o dílo náhody, kdy génius s místními vazbami zahoří pro krystalografii. Zásadní otázkou pro oddělení strukturní analýzy tedy je, jestli se někdo takový opět objeví.

Dalším problémem současnosti je pro nás to, že účelové financování výzkumu přerostlo na národní i Evropské úrovni do zrušného molocha, který místo aby pomáhal, tak dusí a živí pouze sám sebe. Fungování vědy je postavené na předpokladu, že o tom, co je hodno výzkumu, nebudou rozhodovat vědecké instituce, ale tzv. Poskytovatelé, jejichž primárním cílem je udržet v chodu své úřady a ospravedlnit vlastní existenci. Cesta ven není ve vylepšování, ale ve zrušení tohoto systému, což si ale málokdo připouští, takže nás čekají buď dlouhá desetiletí stagnace nebo nějaká očistná, ale velmi nepřijemná, krize.

Další poznámka se týká přístrojového vybavení. Pro RTG analýzu je nadějí výzva OP JAK, součást výše zmíněného molocha, kde by bylo možné získat prostředky pro modernizaci difraktometrů. V oboru elektronové difrakce je situace složitější. V počátcích se jednalo o poměrně finančně nenáročný obor, protože difrakce nevyžadovala vysoké rozlišení. Postupně se ale ukazuje, že další rozvoj metody a souvisejícího materiálového výzkumu nebude možný, pokud se zainteresovaným institucím nepodaří dohodnout a realizovat nákup velmi drahého, ale nezbytného, korigovaného mikroskopu. Bez tohoto výdobytku čeká Prahu a okolí propad do průměru.

Literatura

1. M. Dušek, *Material Structure*, **17**, no. 2a, k43-k46.
2. L. Palatinus, G. Chapuis, *J. Appl. Crystallogr.*, **40**, (2007), 786.
3. L. Palatinus, P. Brázda, P. Boullay, O. Perez, M. Klementová, S. Petit, V. Eigner, M. Zaarour, S. Mintova, *Science*, **355**, (2017), 166-169.
4. P. Brázda, L. Palatinus, M. Babor, *Science*, **364**, (2019), 667-669.
5. L. Palatinus, P. Brázda, M. Jelínek, J. Hrdá, G. Steciuk, M. Klementová, *Acta Cryst.*, **B75**, (2019), 512-522.
6. V. Petříček, L. Palatinus, J. Plášil, M. Dušek, *Z. Kristallogr.*, (2023). Accepted for publication, <https://doi.org/10.1515/zkri-2023-0005>.
7. L. Palatinus, V. Petříček, C.A. Correa, *Acta Cryst.*, **A71**, (2015), 235-244.
8. P. Brázda, M. Klementová, Y. Krysiak, L. Palatinus, *IUCrJ*, **9**, (2022), 735-755.
9. L. Cañadillas-Delgado, L. Mazzuca, O. Fabelo, J. Rodríguez-Carvajal, V. Petricek, *Inor. Chem.*, **59**, (2020), 17896-17905.
10. K. Zhao, H. Deng, K.A. Ross, V. Petříček, *Science*, **367**, (2020), 1218-1223.
11. T.A. Olds, J. Plášil, A.R. Kampf, A. Simonetti, L.R. Sadeghskani, Y.-S. Chen, P. Burns, *Geology*, **45**, (2017), 1007-1010.
12. J. Rohlíček, E. Skořepová, *J. Appl. Crystallogr.*, **53**, (2020), 841 - 847.
13. W. Hornfeck, *Acta Cryst.*, **A78**, (2022), 149 - 154.

L11

LABORATOŘ PRÁŠKOVÉ DIFRAKCE NA ODDĚLENÍ STRUKTURNÍ ANALÝZY VE FYZIKÁLNÍM ÚSTAVU AV ČR, V. V. I.

J. Rohlíček

Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Czech Republic
rohlicek@fzu.cz

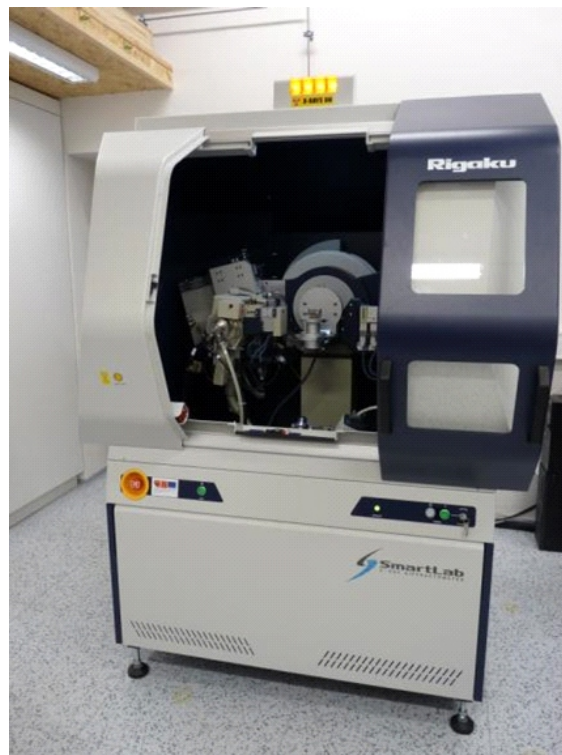
Počátek laboratoře RTG práškové difrakce na oddělení strukturní analýzy Fyzikálního ústavu AV ČR v.v.i. sahá do nedávné minulosti. Rekonstrukci malé opuštěné místnosti bez oken a následnou instalaci práškového difraktometru Emyrean od firmy PANalytical s měděnou rentgenkou v roce 2011 vznikla skromná laboratoř, jejímž hlavním posláním je řešení krystalových struktur z RTG práškových difrakčních dat. Zakoupený difraktometr je z toho důvodu vybaven fokusačním zrcadlem pro měření v transmisním uspořádání, tzv. uspořádání Debye-Scherrer, kde je vzorek umístěn buď mezi dvěma kaptonovými foliemi nebo v tenkostěnné kapiláře, viz. obr. 1. Samozřejmě je možnost osadit přístroj rovinným držákem (uspořádání Bragg-Brentano). Dále je přístroj možné osadit primárním Johanssonovým monochromátorem, který je vhodný pro měření rovinných vzorků. Později byla k přístroji dokoupena chladicí hlava od firmy Cryostream pro chlazení vzorků v kapiláře s teplotním rozsahem 90–500 K.



Obrázek 1: Difraktometr Emyrean vyfocený s nejpoužívanější konfigurací: Debye-Scherrer uspořádání - fokusační zrcadlo, vzorek v kapiláře, PIXCel^{3D} detektor a případné chlazení vzorku.

V roce 2015 byl zakoupen práškový difraktometr SmartLab od firmy Rigaku s 9kW Cu rotační anodou, viz. obr. 2. Přístroj byl pořízen v rámci projektu ASTRA a na pořizovacích nákladech se podílelo také oddělení spintroniky a nanoelektroniky. Difraktometr musí uspokojit rozdílné potřeby dvou oddělení, z čehož plyne jeho

relativně bohaté vybavení zaměřené pro řešení krystalo-



Obrázek 2: Difraktometr Rigaku SmartLab s rotační anodou. Na obrázku s rovinným držákem, kalibračním nástavcem a bez primárního monochromátoru

vých struktur a pro analýzu tenkých vrstev. Přístroj je možné osadit primárním monochromátorem a kombinovat ho s CBO, CBO-E optikou a dvouodrazovým Ge(220) monochromátorem. Různými kombinacemi je možné produkovat divergenční, paralelní nebo fokusující svazek. Mezi držáky vzorku lze najít XY stoleček, kolébku, držák na rovinný vzorek a držák na kapiláru. Pro detekci RTG záření je možné využít jeden ze tří detektorů – scintilační 0D, polovodičový 1D D/teX Ultra 250 a 2D pixel HyPix-3000 detektor. Dále byla k difraktometru pořízena vysokoteplotní komůrka Anton Paar HTK1200N s možností měření buď v kapiláře nebo na plochem vzorku.

Laboratoř postupně rozšiřovala své možnosti, takže z původní úzké specializace na měření difrakčních dat o vysokém rozlišení pro řešení krystalových struktur se stala laboratoř umožňující i měření tenkých vrstev, pólových obrazců, měření fázových přechodů a *in-situ* měření v reakční kapiláře.



L12

ODDĚLENÍ MATERIÁLOVÉ ANALÝZY VE FYZIKÁLNÍM ÚSTAVU AV ČR

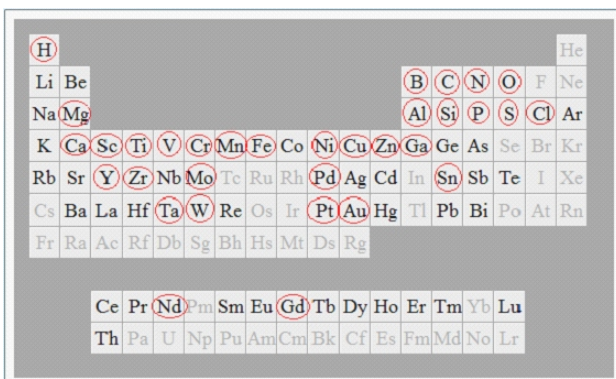
D. Šimek, M. Klementová, Z. Weiss

FZU Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, Praha 8, Czech Republic

simek@fzu.cz

Oddělení Materiálové analýzy Fyzikálního ústavu je oddělením specializujícím se na analytické metody ve fyzice pevných látek, jejichž užití je společně různým výzkumným směrům. Materiály a heterostruktury (vrstvy, povrchové struktury, prototypy) připravené materiálově-výzkumnými skupinami na Ústavu jsou pro účely technologické kontroly, mezipřípravy či charakterizaci výsledků analyzovány metodami provozovanými v laboratřích našeho oddělení.

Laboratoř emisní spektroskopie



Obr. 1. Prvkové detekční kanály spektrometru.

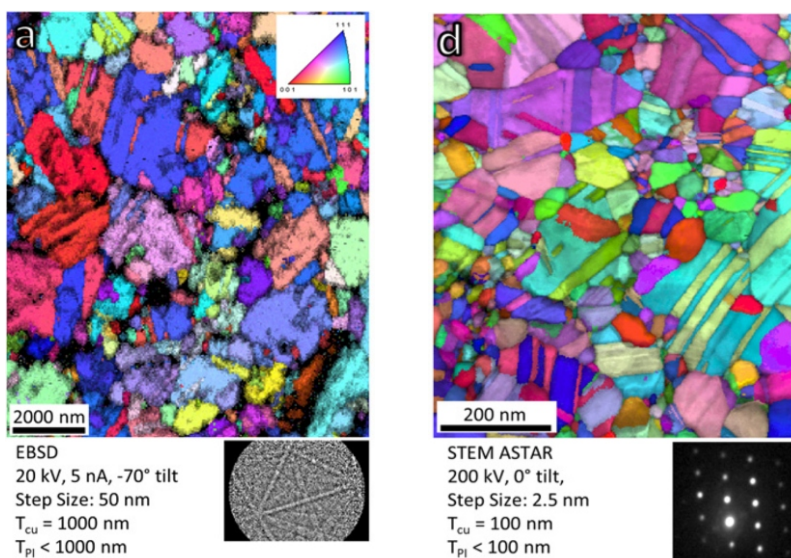
Laboratoř provozuje optický emisní spektrometr s doutnavým výbojem sloužící k přesné prvkové analýze materiálů a hloubkovému profilování tohoto složení. Jeho konfigurace je zvolena tak, aby rychlá a snadno kalibrovatelná analýza pokrývala většinu prvků v materiálech studova-

ných ve výzkumných skupinách Na Slovance (viz Obr. 1). Ostatní prvky je možné detekovat zpracováním celospektrálního signálu zaznamenaného CCD detektorem. Průběžná změna složení během odprašování povrchu doutnavým výbojem umožňuje určit hloubkový profil složení u povrchově upravovaných materiálů.

Laboratoř elektronové mikroskopie (LEM)

Laboratoř elektronové mikroskopie provozuje transmisní (TEM) a řádkovací elektronové mikroskopy (SEM). SEM jsou vybaveny doplňkovými metodami pro analýzu a povrchové mapování prvkového složení (EDAX), mapování orientace (EBSD) s možností opracování povrchů fokusovaným iontovým svazkem (FIB) s ionty Ga nebo Xe. S pomocí FIB lze též (destruktivně) provádět prvkové či orientační mapování do hloubky materiálu mezi jednotlivými odemletými vrstvami. FIB též slouží k "preparaci" jednotlivých mikrostrukturních součástí (fází), jejichž mikro-mechanické vlastnosti lze pak studovat přímo v mikroskopu pomocí nanoindentoru. S pomocí FIB lze rovněž vyříznout z materiálu tenkou lamelu vhodnou pro studium v TEM z místa se zajímavými vlastnostmi.

TEM slouží k pozorování vlastností reálné struktury, zobrazování dislokací, hranic zrn a dvojčat, magnetických domén. TEM lze provozovat též v řádkovacím módu (STEM), je vybaven doplňkovými metodami umožňujícími mapovat jak prvkové složení (EDAX) tak i lokální orientaci (ACOM) s rozlišením řádově přesnějším než v případě SEM (Obr. 2).



Obr. 2. EBSD ze SEM (a) a ACOM ze STEM (d) mapa orientace. Pomněte škálu!

Rtg. laboratoř ROTAN

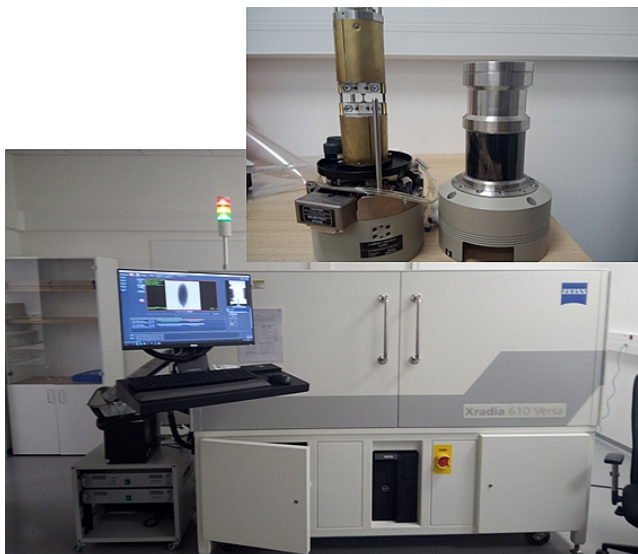
Laboratoř Rotan provozuje rentgenové difraktometry (XRD) a výpočetní tomografii s vysokým rozlišením, zvanou též rtg. mikroskopie (XRM). Rozlišení XRM je více než řádově horší proti SEM, avšak umožňuje zobrazovat nedestruktivně materiál do hloubky (3d) pomocí rekonstrukce absorpčního kontrastu rtg. záření. V XRM je možné též pozorovat materiál během zátěžové zkoušky za zvýšené či snížené teploty.

Rentgenová difrakce se v laboratoři Rotan užívá k široké škále úkonů. Laueho difrakce slouží k určování orientace monokrystalů a jejich orientování pro následné opracování za účelem jiných fyzikálních měření či následné přípravě heterostruktur.

Prášková (polykrystalová) difrakce slouží ke kontrole fázového složení, charakterizaci mikrostruktury (velkost zrn, přednostní orientace) a (mikro)napěťového stavu. Je možné ji provádět v širokém oboru teplot a sledovat tak fázové přechody, včetně rozpadu na strukturní domény.

Difrakce s vysokým rozlišením se užívá ke stanovování stavu epitaxe vrstev (např. polovodiče), velmi přesnému určování orientace facet či měření tloušťek monokrystalických vrstev.

Maloúhlová difrakce (SAXS) slouží k charakterizaci mikrostruktury s kontrastem v hustotě s nanometrickými rozměry. Rtg. reflektivita (XRR) pak umožňuje stanovovat tloušťky a drsnosti velmi hladkých povrchových vrstev bez



Obr. 3. Rtg. mikroskop a jeho teplotně-zátěžová komůrka.

nároku na jejich krystalizační stav. Většinu difrakčních metod lze užívat za nízké či vysoké teploty.

Výsledky práce laboratoří jsou součástí příspěvků našich kolegů.

L13

X-RAY STRUCTURAL ANALYSIS AT THE DEPARTMENT OF CONDENSED MATTER PHYSICS

Milan Dopita, Radomír Kužel, Václav Holý, Lukáš Horák, Stanislav Daniš

*Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Ke Karlovu 5, 121 16, Prague 2, Czech Republic
milan.dopita@matfyz.cuni.cz*

The Group of Structure Analysis at the Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University has a long term tradition going back to the beginning of the Faculty of Mathematics and Physics (founded in 1951). For several decades the group scientists focus to the research of the structure of materials using X-ray diffraction, neutron scattering or synchrotron radiation [1]. The main directions of research include structural analysis and analysis of the real structure of polycrystalline materials, thin layers, multilayers, two-dimensional surface structures, ferroelectrics, semiconductors, magnetic materials, quantum dots, liquid crystals, fullerenes, ultra-fine grained and nanocrystalline materials with the aim to find the relationships between the structure and properties of materials [2].

Recently the group consist of Stanislav Daniš, Petr Doležal, Milan Dopita (head of the group), Václav Holý, Lukáš Horák (head of the X-ray laboratory), Radomír Kužel and Tereza Košutová. It is worth to mention that the past and recent scientific focus of the group was significantly formed by former group members, at the field of crystallography, X-ray scattering and materials science

well known personalities as are or were Josef Šedivý, Václav Valvoda, Pavla Čapková, Ludmila Dobiášová, Radovan Černý, Jan Ilavský, David Rafaja, Zdeněk Matěj, Daniel Šimek.

Besides of the top level own research, awarded by high number of national and international grants, the members of the group are intensively involved in education, teaching and training activities at the faculty, consisting of lecturing and guaranty of courses, exercises and lectures, supervising Bc., Mgr. and PhD students and programs. Additionally the members of the group were and are historically active in CSCA (past scientific secretaries V. Valvoda and R. Černý and recent scientific secretary R. Kužel), and are involved in organization of national and international scientific meetings, crystallographic conferences and workshops.

In past few years the X-ray laboratory, underwent significant instrumental upgrade. Several modern – top class laboratory instruments, substantially broadening the instrumental possibilities and available scattering techniques of the laboratory, were commissioned [3]. Namely i) the general purpose X-ray diffractometer equipped with a high

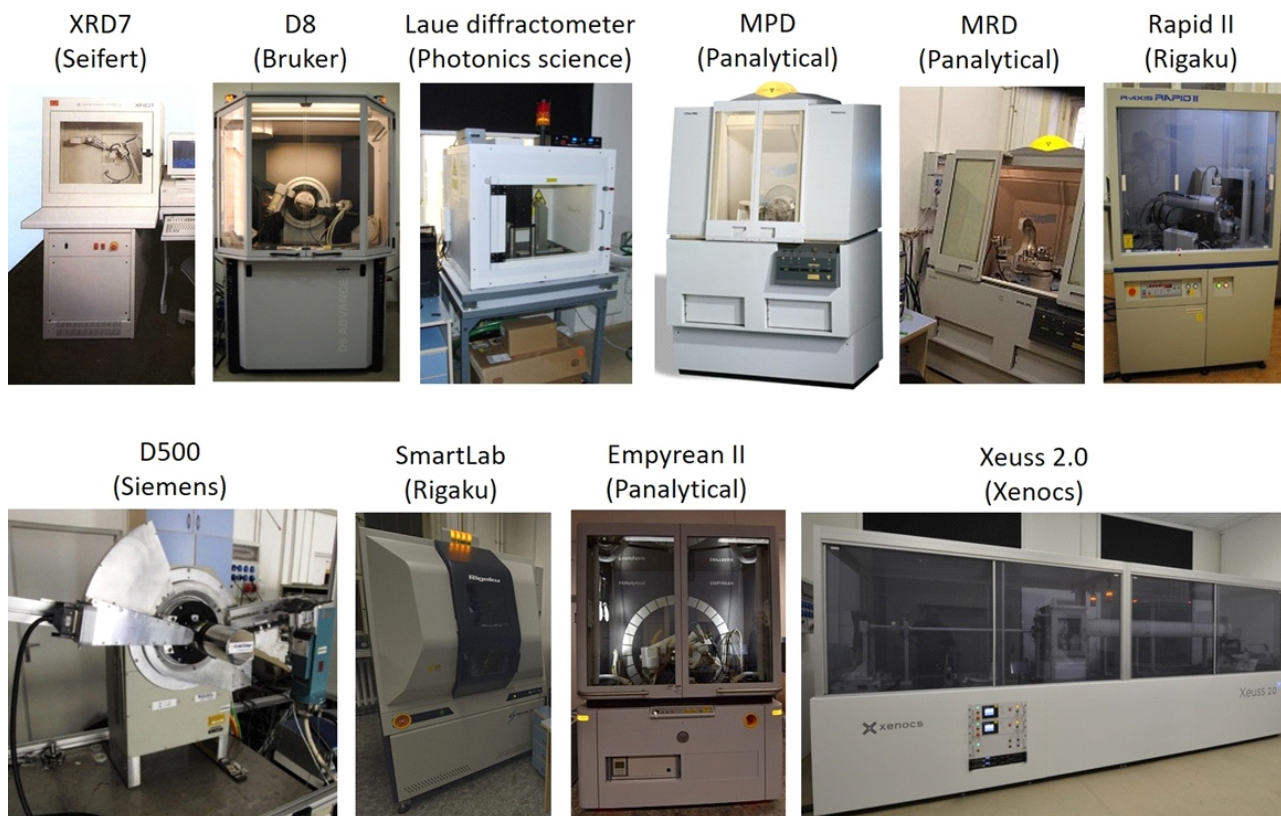


Figure 1. List of X-ray diffractometers available in the X-ray laboratory at the Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University. From left upper corner: Seifert XRD7, Bruker D8, Photonics Science Laue diffractometer, Panalytical MPD, Panalytical MRD, Rigaku Rapid II, left bottom corner: refurbished low temperature diffractometer Dicont based on Siemens D500, Rigaku SmartLab, Malvern-Panalytical Empryan II, Xenocs Xeuss 2.0 SAXS/WAXS diffractometer.

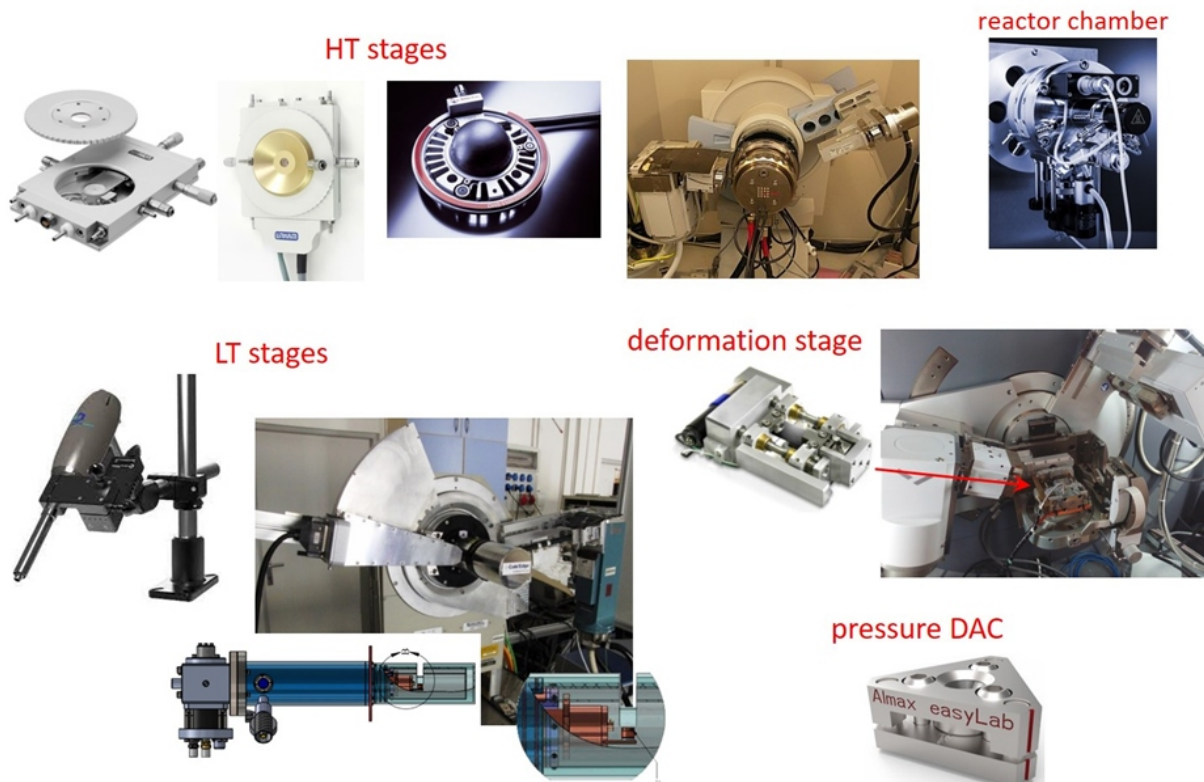


Figure 2 . List of non-ambient conditions chambers and stages available in the X-ray laboratory at the Department of Condensed Matter Physics. From left upper corner: Linkam TS 1000, Linkam THMS 600, Anton Paar DHS 1100, MRI HT-1600 high temperature chambers, Anton Paar XRK 900 reactor chamber, left bottom corner: Oxford Cryosystems Cryostream 800 cooler, Cold Edge closed cycle He Cryostat, MRI compression / tensile stage, Almax easyLab diamond anvil cell.



flux rotation anode X-ray source and goniometer allowing both, coplanar and non-coplanar (in-plane) diffraction; ii) high energy X-ray diffractometer equipped with unique X-ray optical elements, operating with various X-ray energies (6.9 – 22 keV); and iii) apparatus dedicated to a small angle X-ray scattering (SAXS) and small angle X-ray scattering in non-coplanar geometry (GISAXS) measurements. All machines are equipped with modern 2D hybrid pixel, single photon counting, low noise, detectors.

This unique combination of X-ray diffractometers offers measurements covering a wide range of reciprocal space between q of 0.003 to 21 $1/\text{\AA}$ (q is a magnitude of reciprocal space vector), which allows the fundamental studies of materials properties in ranges from 0.03 up to 200 nm, in real space. The equipment represents a unique collection of instruments allowing nearly any type of laboratory accessible X-ray scattering experiment - measurements of single crystals, polycrystalline bulk and powder materials, nanocrystalline samples, thin films, multilayers and epitaxial layers.

The instruments can operate with various X-ray wavelengths (Co, Cu, Mo and Ag), and in different geometries:

Bragg-Brentano geometry, medium resolution parallel beam setting, high resolution geometry, with monochromatic K_1 radiation and in coplanar and non-coplanar (in-plane) mode. Various sample environments, low and high temperature chambers, deformation (tensile and compression) stage, reaction chamber are available for individual diffractometers. Methodologically the laboratory offers the structure solution and refinement, qualitative and quantitative phase analysis, the real structure of material studies: preferred orientation of crystallites – texture measurements, residual stress measurements, reflectivity measurements, rocking curve measurements, reciprocal space mapping, pair distribution function – total scattering measurements, small angle x-ray scattering and grazing-incidence small angle x-ray scattering.

1. V. Valvoda, *Mat. Struc.*, vol. 8, number 2, (2001), 104.
2. R. Kužel, V. Holý, S. Daniš, *Materials Structure*, vol. 17, no. 2a, (2010), k68.
3. <https://kfk1.mff.cuni.cz/en/xray>

The work is supported by the project GA ČR, reg. No. 23-06543S.

L14

STRUCTURAL BIOLOGY AT THE CZECH TECHNICAL UNIVERSITY IN PRAGUE

P. Kolenko

*FJFI, České vysoké učení technické v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 7
kolenpe1@cvut.cz*

Laboratory of Structural Biology at the Czech Technical University in Prague (LSB@CTU, <https://kmlinux.fjfi.cvut.cz/~kolenpe1/>) was founded in 2016. The initial goal of the laboratory was to provide the education support for students who were interested in structure biology at the Institute of Biotechnology AS CR, v.v.i. However, quite soon appeared a possibility to develop its own and partially independent research program.

LSB@CTU does not have the experimental background, and the experimental work totally depends on collaboration with laboratories of the Institute of Biotechnology in Vestec near Prague – Laboratory of Structure and Function of Biomolecules (head Jan Dohnálek) and Laboratory of Biomolecular Recognition (head Bohdan Schneider).

The background in physics and mathematics allows the members to focus on method development, mainly on development of crystallographic software. This work was pioneered by Jan Stránský, who developed several useful scripts focused mainly on experimental phasing or analysis of diffraction intensities.

The key outcome from the laboratory is program *PAIREF* [1,2] developed by Martin Malý. The program performs automatic paired refinement procedure. The program attracted an interest from the *CCP4* developers. It has been included to the *CCP4* software suite since 2022. The

program was written in close collaboration with Kay Diederichs, who became a close partner of the laboratory.

Another program developed in the laboratory is *SHELXIR* [3]. The program performs automatic screening for optimal parameters for experimental phasing procedures. Despite the availability of great structure prediction tools, the method itself belongs to a valuable repertoire of experimental approaches to reveal novel folds and crystal structures.

We are currently working on automatic corrections for multiple lattice-translocation defects. Jakub Hrubý is responsible for thorough testing. In near future, our focus will be diffraction anisotropy and potentially micro-ED. The members of LSB@CTU will benefit from close cooperation with the Institute of Biotechnology AS CR, v.v.i. and partner laboratories from abroad.

1. M. Malý, K. Diederichs, J. Dohnálek, P. Kolenko, *IUCrJ*, **7**, (2020), pp. 681-692.
2. M. Malý, K. Diederichs, J. Dohnálek, P. Kolenko, *Acta Cryst. F77*, (2021), pp. 226-229.
3. P. Kolenko, J. Stránský, T. Kovař, M. Malý, J. Dohnálek, *J. Appl. Cryst.*, **54**, (2021), pp. 996-1005.

This publication was supported by the MEYS CR (projects CAAS – CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000778).