



Session III, September 9, Tuesday

L10

Data and what to do with it DATA A CO S NIMI

Stanislav Daniš

Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2

Umělá inteligence (AI) rozproudila od svého vzniku řadu diskusí na témata "k čemu mi to bude?" až po otázky etického charakteru. Její přítomnost rozhodně změnila způsob vědecké práce. Avšak již dříve se používaly "učící se algoritmy", příchod AI jejich uplatnění podstatně

zrychlil. V přednášce ukážeme několik uplatnění "chytrých algoritmů" ve výzkumu kondenzovaných látek publikovaných v časopisech Nature a Science. Naleznou své místo i v oblasti rozptylu rtg záření?

L11

NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE IN SOLIDS

Vojtěch Chlan

Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Prague

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) provides unique information on the local structure and dynamics of condensed matter and serves as a versatile technique in physics and material science, as well as a valuable tool in chemistry, biochemistry, molecular biology, and medicine. Solid-state NMR spectroscopy allows investigation of a wide range of materials, including crystalline and disordered solids, with unique capabilities for probing both structural and magnetic properties. Local crystal symmetry, valence state. In magnetic solids, though often chal-

lenging, NMR spectroscopy yields additional information about the magnetic state of atoms, can study individual magnetic sublattices, or reveal the direction of magnetic moments.

In the talk, the basic principle of NMR and related spectroscopy will be introduced, its application to solids and magnetic solids will be covered – with a focus on areas where NMR spectroscopy can serve as a complementary method to diffraction techniques.

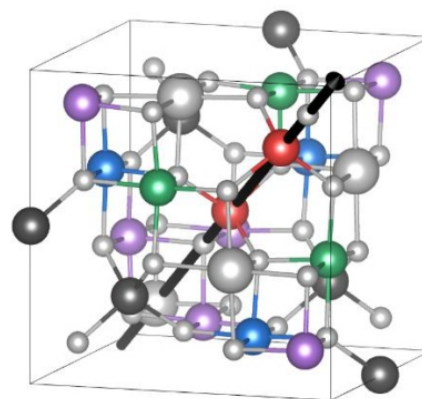
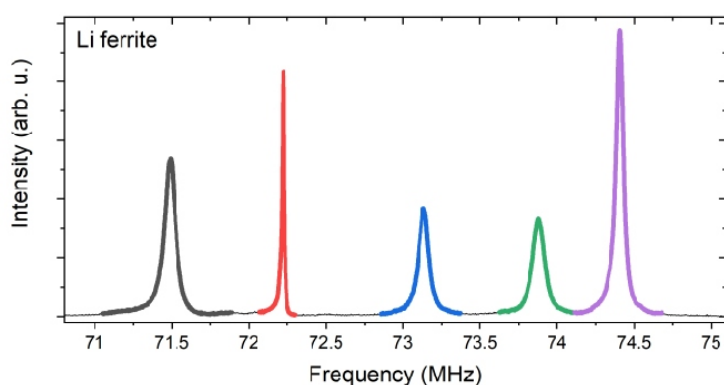


Figure 1. ^{57}Fe NMR spectrum of ferrimagnetic Li spinel ferrite with individual Fe sites distinguished in the unit cell. Five spectral lines appear both because of crystallographic and magnetic non-equivalence of Fe atoms.

SELECTED EXAMPLES IN X-RAY REFLECTOMETRY

Lukáš Horák

Charles University, Faculty of Mathematics and Physics, Prague, Czech Republic

lukas.horak@matfyz.cuni.cz

X-ray reflectivity (XRR) is a well-established and, in principle, straightforward technique for determining the depth profile of electron density in thin films [1]. The presence of interference fringes (Kiessig fringes) in the reflectivity curve typically allows for a direct and accurate estimation of layer thickness. However, in many practical cases, these fringes are weak, distorted, or even completely absent (Figure 1); yet meaningful structural information can still be extracted.

Even when sample imperfections such as surface curvature or thickness inhomogeneity suppress or smear the interference fringes, the absorption contrast can still be exploited to reliably estimate the average layer thickness.

For each sample, one must carefully consider the appropriate level of model complexity for data fitting. Should the model be kept as simple as possible, even if it fails to adequately reproduce the measured data? In cases where the fit is as poor as for some samples shown in Figure 2, how trustworthy are the extracted parameters? Furthermore, is it feasible to fit the electron density depth-profile directly, and if so, can such an approach yield a unique and physically meaningful solution?

This presentation will explore several such cases, where the absence of clear fringes or the use of oversimplified models did not prevent the retrieval of reliable density profiles. Surprisingly, even models that poorly fit the experimental data can yield results comparable to those obtained using significantly more complex and computationally demanding approaches. This raises important

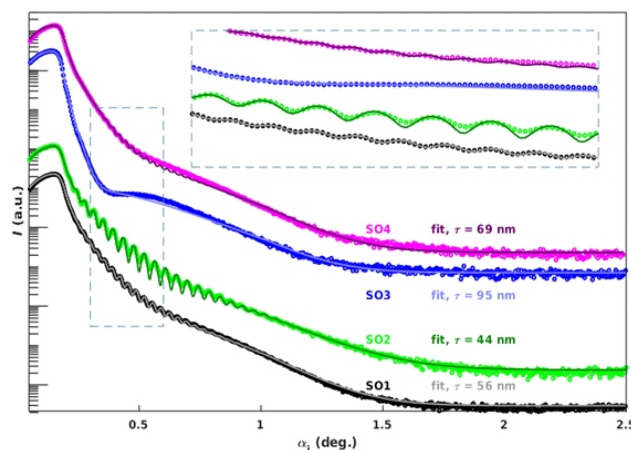


Figure 1. XRR curves measured on Hydrogenated U layers. As it is visible in the inset with the zoomed part, no thickness fringes are present for the sample S03. Is it still possible to determine/estimate the layer thickness by XRR?

questions about the trade-off between model fidelity and interpretability, especially in the context of peer review and publication.

1. L. G. Parratt, *Phys. Rev.* **95**, 359–369 (1954). DOI: 10.1103/PhysRev.95.359.

The work was supported by the project GA ČR, reg. No. 24-12710S.

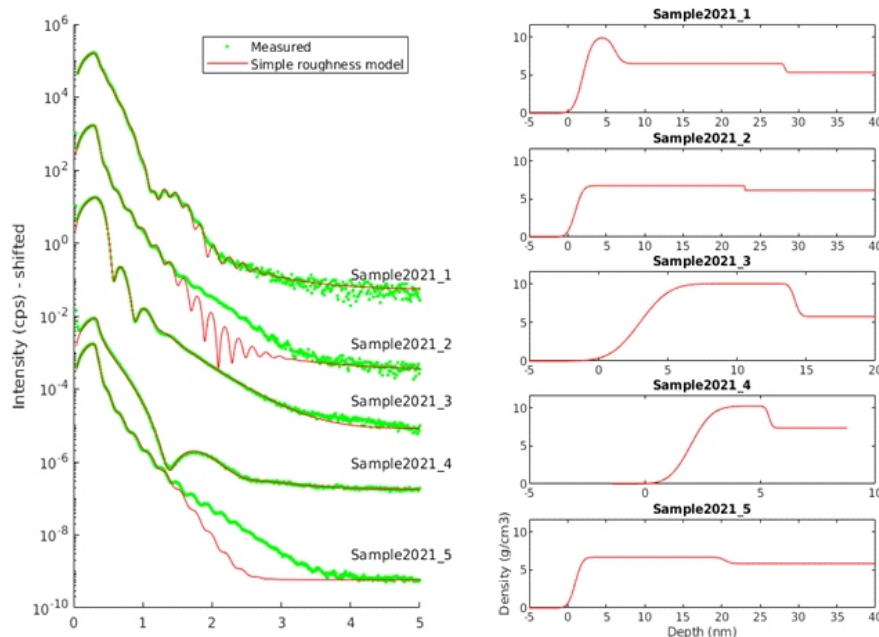


Figure 2. (left) XRR curves of BIO/DTO bilayers on YSZ substrate fitted by the most simple model of two layers with rough interfaces; (right) density depth-profiles visualized for the refined parameters of the model. How reliable are the fitting results when the experimental data are evidently not fully fitted?



Session IV, September 9, Tuesday

L13

First experience with single crystal diffractometer Synergy Rs

PRVNÍ ZKUŠENOSTI S MONOKRYSTALOVÝM DIFRAKTOMETREM SYNERGY VYBAVENÝM ROTAČNÍ ANODOU A ZAKŘIVENÝM HYBRIDNĚ PÍXELOVÝM DETEKTOREM

M. Dušek, V. Petříček

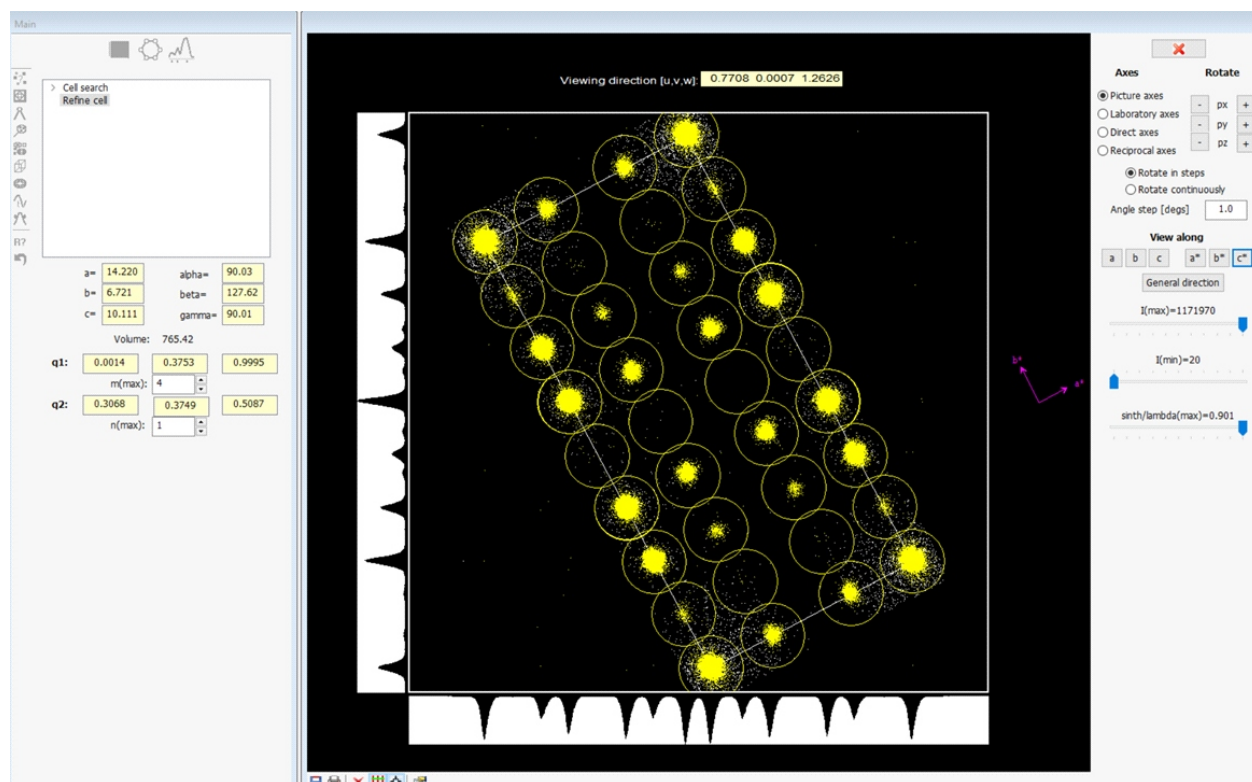
*Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Czech Republic
dusek@fzu.cz*

Nový monokrystalový difraktometr s rotační anodou a velkým zakřiveným detektorem od firmy Rigaku Oxford Diffraction je ve Fyzikálním ústavu v provozu od března 2025. Důvodem nákupu byla potřeba doplnit stávající, zcela přetížený, difraktometr SuperNova přístrojem, který by dosahoval řádově vyšší intenzity při zachování podobného průměru primárního svazku. Průměr svazku je v podmínkách naší laboratoře důležitým parametrem vzhledem k častým experimentům s vysoce adsorbujícími krystaly. Přístroj je navíc vybaven programově ovladatelnou divergenční clonou a možností nastavit energetické okénko pro potlačení luminiscence.

Po několika měsících trvalého provozu jsme dosáhli efektu, který se projevil u všech dříve zakoupených difraktometrů: od počátečního zděšení, co si počneme s tolika výsledky, jsme opět v situaci, kdy typické měření

jednoho vzorku trvá jeden až dva dny. Rozdíl je pouze v tom, že dříve bychom tyto vzorky vyřadili jako neměřitelné. V čem je tedy skutečné zlepšení, když pomineme výhodu pro chemiky, kteří mohou stále víc odbývat přípravu kvalitních monokrystalů? V přednášce ukazujeme, že skutečné zlepšení spočívá v tom, že z krystalu dobré kvality můžeme vydobýt podstatně víc informací.

Jako příklad jsme použili krystal YP_3O_9 , jehož struktura byla publikována v roce 2003 [1] jako standardní struktura. Později byla látka změřena jako (3+1)d modulovaná, tedy s jedním modulačním vektorem, a dlouhá léta používána v tzv. Kuchařce programu Jana2020 [2] jako příklad jednoduché modulované struktury. Ve finální řešení ale pro některé řezy superprostorem vycházely nesmyslné „teplotní“ parametry (ADP – atomic displacement parameters), což nás vedlo k přeměření vzorku na



Obrázek 1. Indexační nástroj programu Jana2020 ukazující projekci nahledaných piků do jedné základní buňky. Na delší hraně zobrazené buňky vidíme první, druhé a třetí satelity popsané q-vektorem (0, 0.375, 0). Nejintenzivnější reflexe uvnitř buňky jsou první satelity popsané q-vektorem (0.307, 0.375, 0.509). Všechny ostatní stopy lze popsat kombinací obou q-vektorů, čímž je indexován celý difrakční obraz (cca 98% nahledaných piků).

difraktometru Supernova. Zde se ukázalo, že existuje další set mnohem slabších satelitních reflexí, a že tedy strukturu lze popsat pouze s dvěma modulačními vektory. Data ale byla příliš slabá, než aby to stálo za vynaložené úsilí. Konečně, v tomto roce, byl ten samý krystal přeměřen na našem novém difraktometru. Několikadenní měření ukázalo, že kromě druhého modulačního vektoru existují i satelitní reflexe vzniklé kombinací obou modulačních vektorů, což je důkazem, že se jedná o (3+2)d modulovanou strukturu. Získaný difrakční obraz ukazuje obr. 1.

Difraktometr s takto intenzivním zdrojem vrací do hry starou otázku, jestli je lepší měřit vzorek deset minut na synchrotronu, anebo týden v domácí laboratoři. Naše

zkušenosti ukazují, že pokud nemáme dlouholeté zkušenosti se synchrotronovým experimentem a dobré kontakty na tamější experimentátory, je lepší věnovat na to experimentální čas a měřit doma.

V závěru přednášky ukážeme, jakou strategii sdílí výrobci difraktometrů a výrobci mikrovlnných trub a rychlovarných konvic.

1. M. Graia, A. Driss, T. Jouini, *Solid State Sciences*, **5**, (2003), 393.
2. V. Petříček, L. Palatinus, J. Plášil, M. Dušek, , *Z. Kristallog. – Cryst. Mater.*, **238**, (2023), 271.

L14

INTERPRETATION OF ELECTRON DENSITY MAPS USING NEURAL NETWORKS

Jiří Zelenka, Jan Rohlíček

Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Prague

The interpretation of Fourier maps is an important process in X-ray diffraction analysis. Their quality and resolution can be limited by a number of factors, including the disorder of atoms in the crystal and poorly measured diffraction data, which can be caused, for example, by crystal instability during the experiment, twinning, small crystal size, or otherwise poor quality of the measured crystals. These imperfections often lead to blurred or difficult-to-interpret maps, which complicate the determination of the crystal structure and cause headaches for many crystallographers.

In this work, we present a possible approach that could help interpret low-resolution maps. This approach uses

deep learning capabilities to recognize and reconstruct relevant features in maps. In the reconstructed maps, noise is removed and blurred parts of the map, which appear to be meaningless blobs, are interpreted. This approach can be applied at various stages of structural analysis. For example, when interpreting maps after solving a phase problem or interpreting differential Fourier maps. This approach is also applicable to various groups of substances and materials, regardless of whether they are inorganic, organic, or even protein structures, thus opening up new possibilities for streamlining the entire structural analysis process.



L15

USE OF INTERMOLECULAR DISTANCES IN SOLVING STRUCTURES FROM POWDERS

J. Rohlíček¹, J. Brus², V. Eigner³

¹*Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, Prague 8, 182 21, Czech Republic*

²*Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Heyrovsky Square 2, Prague, 16206, Czech Republic*

³*Department of Solid State Chemistry, University of Chemical Technology Prague, Prague 6, 166 28, Czech Republic
rohlicek@fzu.cz*

This study introduces a methodology that incorporates supplementary structural information about intermolecular distances obtained from solid-state NMR (ssNMR) measurements into direct-space approach for crystal structure determination from powder diffraction (PD) data [1]. In these methods, such intermolecular distances are applied as restraints within the global optimization process. Direct-space techniques are highly effective for solving structures from PD data, particularly when only a laboratory diffractometer is available. They employ global optimization algorithms which, iteratively test candidate structural models for agreement with experimental diffraction patterns.

For structurally simple, well-diffracting compounds, the probability of identifying the correct model is high. However, the success rate decreases rapidly with the number of degrees of freedom (DOF). A compound with six DOF can often be solved within seconds, whereas those with around 40 DOF are frequently unsolvable using PD data alone, except in rare cases [2]. The problem becomes even worst for poorly crystalline materials, where peak broadening reduces the resolution of diffraction data.

In this work, selected intermolecular distances determined from ssNMR experiments were used as additional

restraints in the structure determination process. The FOX software [3] was modified to include a new term in the cost function that enforces agreement with experimentally derived interatomic distances between specific atoms of different molecules. These restraints, assigned tolerances based on NMR measurement precision, were tested on a series of relatively simple isothiuronium salts. To simulate challenging experimental conditions, diffraction peak profiles were artificially broadened. The results demonstrate that including ssNMR-based restraints significantly improves the likelihood of obtaining the correct structural solution, even from low-quality PD data.

1. J. Rohlíček, V. Eigner, J. Czernek, J. Brus, *J. Appl. Crystallogr.* **58** (2025) 321-332.
2. M. Husak, A. Jegorov, J. Czernek, J. Rohlíček, S. Zizkova, P. Vraspir, P. Kolesa, A. Fitch, J. Brus, *Cryst. Growth Des.* **19** (2019) 4625-4631.
3. V. Favre-Nicolin, R. Černý, Z. Für Krist. - Cryst. Mater. **219** (2004) 847-856.

This work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic, project no. 23-05293S.