

PROGRAM KONWERSATORIUM I WARSZTATÓW POLSKIEGO TOWARZYSTWA KRYSTALOGRAFICZNEGO PROGRAMME OF THE MEETING AND PCrA WORKSHOP

Środa, 25 czerwca 2025 r. / Wednesday, June 25, 2025

- | | | |
|---------------|---|---|
| 9:00 – 13:15 | WARSZTATY NAUKOWE PTKryst / PCrA WORKSHOP
Presentation and demonstration of CCDC tools
<u>Pablo Martinez-Bulit</u> , Izabela Madura
The Cambridge Crystallographic Data Centre, Politechnika Warszawska | W |
| 15:00 – 21:00 | SESJA NAUKOWA SEKCJI MŁODYCH KRYSTALOGRAFÓW
POLSKIEGO TOWARZYSTWA KRYSTALOGRAFICZNEGO /
SCIENTIFIC SESSION OF THE YOUNG CRYSTALLOGRAPHERS
SECTION OF THE POLISH CRYSTALLOGRAPHIC ASSOCIATION | M |

Czwartek, 26 czerwca 2025 r. / Thursday, June 26, 2025

- | | | |
|---------------|---|-----|
| 9:00 – 9:30 | OTWARCIE KONWERSATORIUM / OPENING CEREMONY
Wręczenie nagród laureatom 6. Olimpiady Krystalograficznej
Award ceremony for the winners of the 6 th Crystallographic Olympiad
Ogłoszenie wyników konkursów Diamenty 2023 oraz 2024
Announcement of the results of the Diamonds 2023 and 2024 competitions

SESJA REFERATÓW 1 / ORAL PRESENTATIONS 1 | |
| 9:30 – 10:00 | <u>Grzegorz Bujacz</u> , Kajetan Duszyński, Anna Bujacz
Struktury krystaliczne ptasich i ssaczych surowiczych albumin
Instytut Biotechnologii Molekularnej i Przemysłowej, Politechnika Łódzka | R-1 |
| 10:00 – 10:20 | <u>Krzysztof Brzeziński</u>
A closer look at molecular mechanisms underlying inhibition of
S-adenosyl-L-homocysteine hydrolase by transition metal cations
Department of Structural Biology of Prokaryotic Organisms, Institute of Bioorganic
Chemistry, Polish Academy of Sciences | R-2 |
| 10:20 – 10:40 | <u>Maura Malińska</u>
Advancing protein structure and ligand binding studies with quantum
crystallography
Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski | R-3 |
| 10:40 – 11:00 | <u>Bartosz Sekuła</u> , Maciej Nielipiński, Agnieszka Pietrzyk-Brzezińska
Arginine metabolism as a molecular target for herbicide development
Institute of Molecular and Industrial Biotechnology, Faculty of Biotechnology and Food
Sciences, Lodz University of Technology | R-4 |

11:00 – 11:30 PRZERWA / BREAK

SESJA REFERATÓW 2 / ORAL PRESENTATIONS 2

- 11:30 – 11:40 Ellen Häußler, Kaushick Parui, Anton A. Kulbakov, Darren C. Peets, Dmytro S. Inosov, **Thomas Doert** R-5
Double hydroxides $BB'(OH)_6$ – hydrogen disorder and magnetic frustration
Faculty of Chemistry and Food Chemistry; Institute of Solid State and Materials Physics, Technische Universität Dresden
- 11:40 – 12:00 Wojciech Sławiński, Grzegorz Łach, Roman Gajda, Michał Chodkiewicz, Piotr Rejnhardt, Mihails Arhangeliskis, Christopher Ridlay, Craig Bull, **Krzysztof Woźniak** R-6
Hidden complexity in D_2O ice VII
Faculty of Chemistry; Faculty of Physics, University of Warsaw; ISIS Neutron and Muon Source, STFC, Rutherford Appleton Laboratory; EaStCHEM School of Chemistry, University of Edinburgh; Spallation Neutron Source, Oak Ridge National Laboratory
- 12:00 – 12:20 **Andrzej Katrusiak** R-7
Crystallographic quaternions
Department of Materials Chemistry, Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University
- 12:20 – 12:40 **Pablo Martinez-Bulit** R-8
Crystal Structure Exploration - I didn't know Mercury could do that
The Cambridge Crystallographic Data Centre
- 12:40 – 12:50 **Marek Daszkiewicz**, Kinga Fojcik R-9
S-ibuprofen at extreme conditions
Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu

12:50 – 15:00 PRZERWA / BREAK

SESJA REFERATÓW 3 / ORAL PRESENTATIONS 3

- 15:00 – 15:20 **Felix Hennersdorf** R-10
Advancing structural science: innovations in Rigaku Oxford Diffraction instrumentation
Rigaku Europe SE, Neu-Isenburg, Germany
- 15:20 – 15:30 **Andrzej Wojtas** R-11
Prezentacja dyfraktometrów firmy PROTO Manufacturing
PROTO Manufacturing Europe Sp. z o.o. / METLAB Sp. z o.o.
- 15:30 – 15:50 **Szymon Stolarek** R-12
Enabling nanoscale insight: advanced X-ray scattering solutions from Xenocs
Xenocs SAS

15:50 – 16:10	<u>Sebastian Machowski</u> Charakterystyka materiałów akumulatorowych przy użyciu technik dyfrakcji rentgenowskiej Testchem Sp. z o. o.	R-13
16:10 – 16:30	<u>Jakub Al Samarrai</u> Technologia D8: napędzając nowoczesną naukę Labsoft, Bruker AXS	R-14
16:30 – 16:50	Sandra Zierler, Fazilet Guerer, <u>Kamil Urbański</u> High-quality Pair Distribution Function (PDF) analysis in home laboratory Anton Paar GmbH, Austria; Anton Paar Poland sp. z o.o.	R-15
16:50 – 17:00	<u>Patryk Wróbel</u> Nowoczesne metody analizy struktury i faz materiałów: rozwiązania XRD oferowane przez firmę Scanmat i LANScientific SCANMAT Sp. z o.o.	R-16
17:00 – 18:30	SESJA PLAKATOWA A / POSTER SESSION A	
17:00	Przekąski serwowane dzięki wsparciu Rigaku Europe SE Snacks served with the support of Rigaku Europe SE	

Piątek, 27 czerwca 2025 r. / Friday, June 27, 2025

9:00 – 10:30	SESJA PLAKATOWA B / POSTER SESSION B	
10:30 – 10:45	PRZERWA / BREAK	
	SESJA REFERATÓW 4 / ORAL PRESENTATIONS 4	
10:45 – 11:05	<u>Svitlana Shishkina</u> , Olexander Shalimov Competition of strong hydrogen bonds as a reason for the concomitant polymorphs formation State Scientific Institution, Institute for Single Crystals, NAS of Ukraine; Institute of Organic Chemistry, NAS of Ukraine	R-17
11:05 – 11:25	<u>Anna Makal</u> Triethylphosphine: a ‘molecular gear’ enabling SCSC phase transitions University of Warsaw, Faculty of Chemistry, Biological and Chemical Research Centre	R-18
11:25 – 11:45	<u>Oskar Kaszubowski</u> , Katarzyna Ślepokura Nucleotide crystal structure landscape exploration in the light of dehydration Faculty of Chemistry, University of Wrocław	R-19

- 11:45 – 12:05 **Urszula Maciołek**, Rafał Typek, Anna E. Koziół R-20
Flawonoidy w supramolekularnych układach dwuskładnikowych: od struktury do rozpuszczalności
 Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Lublin
- 12:05 – 12:25 Dorota Głosz, Aleksandra Żabińska, Martyna Dyczkowska, Joachim Grzybowski, Monika Srebro-Hooper, James G. M. Hooper, Tadeusz M. Muzioł, **Robert Podgajny** R-21
Syntony anion- π , π - π i wiązania wodorowe z udziałem wielopozycyjnych receptorów anionów – nowa biblioteka wieloskładnikowych kryształów i adduktów molekularnych
 Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie; Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie; Wydział Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu
- 12:25 – 12:45 **Piotr A. Guńka** R-22
Interkalaty tlenku arsenu(III): porównanie stereoaktywności par elektronowych arsenu i siły oddziaływań drugorzędowych
 Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska
- 12:45 – 13:05 Natalia Miniajluk-Gaweł, **Paweł Tomaszewski** R-23
Połowanie na Shreka
 Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
- 13:05 – 13:20 **ZAKOŃCZENIE KONWERSATORIUM / CLOSING CEREMONY**
Wręczenie dyplomów za najlepsze prezentacje plakatu
Granting diplomas for the best poster presentations
- 15:00 – 17:00 **WALNE ZEBRANIE SPRAWOZDAWCZO-WYBORCZE POLSKIEGO TOWARZYSTWA KRYSTALOGRAFICZNEGO / GENERAL ASSEMBLY MEETING OF THE POLISH CRYSTALLOGRAPHIC ASSOCIATION**

PROGRAM SESJI NAUKOWEJ SEKCJI MŁODYCH KRYSTALOGRAFÓW POLSKIEGO TOWARZYSTWA KRYSTALOGRAFICZNEGO

PROGRAMME OF THE SCIENTIFIC SESSION OF THE YOUNG CRYSTALLOGRAPHERS SECTION OF THE POLISH CRYSTALLOGRAPHIC ASSOCIATION

Środa, 25 czerwca 2025 r. / Wednesday, June 25, 2025

15:00 – 15:15 OTWARCIE SESJI / OPENING CEREMONY

- 15:15 – 15:25 **Maciej Ejnik**, Piotr Bruździak, Anna Ciborska, Anna Dołęga M-1
Aktywacja wiązania nitrylowego w kompleksach złota(III) z ligandami N-donorowymi – studium strukturalno-obliczeniowe
Katedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska
- 15:25 – 15:35 **Emilia Wiatr**, Michał Duda M-2
Analiza próbek ultramaryny przy użyciu techniki rentgenowskiej dyfraktometrii proszkowej
Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
- 15:35 – 15:45 **Monika Hryniuk** M-3
Przyjaciele od zadań specjalnych: jak EPR i pomiary magnetyczne mogą uzupełnić wyniki rentgenograficzne
Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski
- 15:45 – 15:55 **Kinga Pokrywka**, Marta Grzechowiak, Joanna Sliwiak, M-4
Paulina Worsztynowicz, Joanna Loch, Mirosław Gilski, Mariusz Jaskolski
Structural insights into stable ligand complexes of class 3 L-asparaginase
Institute of Bioorganic Chemistry, Polish Academy of Sciences; Department of Crystal Chemistry and Crystal Physics, Faculty of Chemistry, Jagiellonian University; Department of Crystallography, Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University
- 15:55 – 16:05 **Vladyslav Maliuzhenko**, Marek Weselski, Jakub Wojciechowski, M-5
Robert Bronisz
Structural transformations caused by visible-light induced cycloaddition in novel polyaromatic-based photoresponsive coordination systems
Faculty of Chemistry, University of Wrocław; Rigaku Europe SE
- 16:05 – 16:20 PRZERWA / BREAK

16:20 – 16:30	<u>Adrian Kowaliński</u> , Rafał Petrus Synthesis of heterometallic rare-earth complexes using homometallic zinc precursors Faculty of Chemistry, Wrocław University of Science and Technology	M-6
16:30 – 16:40	<u>Bartosz Cieśla</u> , Łukasz Ponikiewski, Piotr Bruździak, Zbigniew Hnatejko, Renata Łyszczek, Agnieszka Pladzyk Wpływ podstawników w pierścieniu pirazynowym na strukturę i właściwości heteroleptycznych silanotiolanów cynku(II) i kadmu(II) Katedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska; Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska; Zakład Ziem Rzadkich, Wydział Chemiczny, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza; Katedra Chemii Ogólnej, Koordynacyjnej i Krystalografii, Wydział Chemii, Instytut Nauk Chemicznych, Uniwersytet im. Marii Curie-Skłodowskiej	M-7
16:40 – 16:50	<u>Karolina Matuszak</u> , Rafał Petrus Heterometallic alkali metal – magnesium/zinc/calcium aryloxides based on double-opened dicubane core structure Wrocław University of Science and Technology, Faculty of Chemistry	M-8
16:50 – 17:00	<u>Pablo Martinez-Bulit</u> Crystal structure exploration – I didn't know Mercury could do that The Cambridge Crystallographic Data Centre	M-9
17:00 – 17:10	<u>Daniel Mariusz Tchoń</u> , Stef Smeets, Lukáš Palatinus Generalizing instamatic data collection framework for electron crystallography Institute of Physics, Czech Academy of Sciences; Netherlands eScience Centre	M-10
17:10 – 17:25	PRZERWA / BREAK	
17:25	WRĘCZENIE NAGRÓD / AWARD CEREMONY	