

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

Środa, 5 lipca 2023 r. / Wednesday, July 5, 2023
Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN

9:00 – 13:30	WARSZTATY NAUKOWE PTKryst / PCA WORKSHOP Practical electron crystallography using Rigaku XtaLAB Synergy-ED instrument <u>Jakub Wojciechowski</u> Rigaku Europe, Neu-Isenburg	W
15:00 – 19:30	SESJA NAUKOWA SEKCJI MŁODYCH KRYSTALOGRAFÓW POLSKIEGO TOWARZYSTWA KRYSTALOGRAFICZNEGO / SCIENTIFIC SESSION OF THE YOUNG CRYSTALLOGRAPHERS SECTION OF THE POLISH CRYSTALLOGRAPHIC ASSOCIATION	S-1 do S-16

Czwartek, 6 lipca 2023 r. / Thursday, July 6, 2023
Centrum Kongresowe Politechniki Wrocławskiej

9:00 – 9:30	OTWARCIE KONWERSATORIUM / OPENING CEREMONY UROCZYSTE WRĘCZENIE NAGRÓD LAUREATOM V OGÓLNOPOLSKIEJ OLIMPIADY KRYSTALOGRAFICZNEJ/ AWARDS GIVEAWAY TO THE WINNERS OF 5TH NATIONAL CRYSTALGRAPHIC OLYMPIAD	
	SESJA PLENARNA 1 / PLENARY SESSION 1	
9:30 – 9:50	<u>Grygoriy Dmytriv</u> , Nazar Pavlyuk, Volodymyr Pavlyuk, Helmut Ehrenberg Crystallography and art: on examples of core-shell structures Ivan Franko National University of Lviv; Jan Długosz University in Częstochowa; Karlsruhe Institute of Technology, Eggenstein-Leopoldshafen	O-1
9:50 – 10:10	<u>Andrzej Katrusiak</u> , Kinga Roszak Preference for low-density high-pressure polymorphs of DL-menthol Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Poznań	O-2
10:10 – 10:20	<u>Szymon Sobczak</u> , Andrzej Katrusiak High-pressure synthesis of novel perovskites Adam Mickiewicz University, Poznań	O-3

- 10:20 – 10:40 **Jarosław Serafińczuk** O-4
Wysokorozdzielcza dyfrakcja rentgenowska w badaniach warstw epitaksjalnych prowadzona od krawędzi próbki
 Katedra Nanometrologii, Politechnika Wroclawska; Sieć Badawcza Łukasiewicz - PORT
 Polskie Centrum Rozwoju Technologii, Wrocław
- 10:40 – 11:00 **Zbigniew Kaszkur**, Ilia Smirnov O-5
Nanocrystallography *in situ* (Nanopowder diffraction *in situ*)
 Institute of Physical Chemistry PAS, Warszawa
- 11:00 – 11:30 **PRZERWA / BREAK**

SESJA PLENARNA 2 / PLENARY SESSION 2

- Sesja specjalna dedykowana Profesorowi Januszowi Lipkowskiemu z okazji 80-rocznicy urodzin**
Special session dedicated to Professor Janusz Lipkowski on the occasion of his 80th birthday
- 11:30 – 11:40 **Kinga Suwińska** O-6
Jubileusz Profesora Janusza Lipkowskiego - wprowadzenie do sesji specjalnej
 Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego w Warszawie
- 11:40 – 11:55 Ewelina Zaorska, **Maura Malińska** O-7
Unlocking the secrets of molecular recognition in aqueous solutions: a study on the properties of cucurbit[7]uril and neurotransmitters/ amino acids complexes
 Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski
- 11:55 – 12:05 **Armand Budzianowski**, Katarzyna Betlejewska-Kielak, Elżbieta Bednarek, O-8
 Katarzyna Michalska, Jan K. Maurin
Characterization of the flurbiprofen- β -cyclodextrin inclusion complex by X-ray techniques
 National Centre for Nuclear Research, Otwock; Department of Synthetic Drugs, National Medicines Institute, Warsaw; Falsified Medicines and Medical Devices Department, National Medicines Institute, Warsaw
- 12:05 – 12:25 **Vasyl Kinzhybalo**, Marta Otręba, Jakub Wojciechowski, Miłosz Siczek, O-9
 Katarzyna Ślepokura
Combining X-ray and electron diffraction for dehydration and structural description of sodium hypodiphosphates
 Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, Wrocław; University of Wrocław, Faculty of Chemistry; Rigaku Europe SE, Neu Isenburg
- 12:25 – 12:35 **Urszula Maciołek**, Ewaryst Mendyk, Marcin Kuśmierz, Anna E. Koziół O-10
Kwercetyna jako synton supramolekularny w układach dwuskładnikowych
 Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Lublin
- 12:35 – 12:55 G. J. Reiss, M. Wyshusek, **I. S. Konovalova** O-11
What is the actual supramolecular architecture of theophylline polymorphs and co-crystals with water and iodine from energetic viewpoint?
 SSI "Institute for Single Crystals", National Academy of Science of Ukraine, Kharkiv; Bioinorganic Chemistry, Heinrich-Heine-University, Düsseldorf

12:55 – 13:05	<u>Katarzyna Jarzemska</u> Tracing of transient species <i>via</i> combined crystallographic and spectroscopic methods – new perspectives from the XFEL Centers of Excellence initiative Department of Chemistry, University of Warsaw	O-12
13:05 – 15:00	PRZERWA / BREAK	
	SESJA PLENARNA 3 / PLENARY SESSION 3	
15:00 – 15:20	<u>Jakub Wojciechowski</u> , Khai Truong, Christian Goeb, Christian Schürmann, Robert Bückner, Mathias Meyer, Fraser White Rigaku advances in X-ray and electron crystallography Rigaku Europe SE, Neu-Isenburg	O-13
15:20 – 15:40	Maciej Grzywa, <u>Sebastian Machowski</u> Określanie struktury z użyciem wysokiej jakości danych rentgenowskiej dyfrakcji proszkowej Testchem Radlin; Rigaku Europe SE, Neu-Isenburg	O-14
15:40 – 16:00	Eddy Martin, <u>Vernon Smith</u> Latest development in SC-XRD from Bruker AXS Bruker AXS GmbH	O-15
16:00 – 16:20	<u>Lei Ding</u> , Marco Sommariva, Milen Gateshki Hard-radiation laboratory X-ray powder diffraction Malvern Panalytical B.V., Almelo	O-16
16:20 – 16:40	<u>Kamil Urbański</u> Możliwości badawcze XRD poza warunkami otoczenia Anfon Paar Poland, Warszawa	O-17
16:40 – 17:00	<u>Szymon Stolarek</u> , A. Cheminal, B. Faure, S. Rodrigues, P. Panine Extending measuring length (and time) scales of laboratory SAXS/WAXS beamlines Xenocs SAS, Grenoble	O-18
17:00 – 17:20	<u>Maja Zupancic</u> Expanding single crystal design space using temperature and vacuum in the CrystalBreeder Technobis Crystallization Systems, Alkmaar	O-19
17:30 – 20:00	SESJA PLAKATOWA A / POSTER SESSION A	

Piątek, 7 lipca 2023 r. / Friday, July 7, 2023
Centrum Kongresowe Politechniki Wrocławskiej

SESJA PLENARNA 4 / PLENARY SESSION 4

- 9:00 – 9:15** **Joanna Loch**, Paulina Worsztynowicz, Joanna Śliwiak, Barbara Imiołczyk, Kinga Pokrywka, Mateusz Chwastyk, Marta Grzechowiak, Mirosław Gilski, Mariusz Jaskólski **O-20**
Structural characterization of *Rhizobium etli* thermostable L-asparaginase ReAIV
Faculty of Chemistry, Jagiellonian University, Krakow; Institute of Bioorganic Chemistry, Polish Academy of Sciences, Poznań; Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw; Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Poznań
- 9:15 – 9:30** **Mirosław Gilski**, Julian C.-H. Chen, Changsoo Chang, Maciej Kubicki, Mariusz Jaskólski, Andrzej Joachimiak **O-21**
What to do with a vast amount of protein diffraction data at an extremely high resolution of 0.38Å
Institute of Bioorganic Chemistry, Polish Academy of Sciences, Poznań; Faculty of Chemistry, A. Mickiewicz University, Poznań; Structural Biology Center, Biosciences Division, Argonne National Laboratory
- 9:30 – 9:50** Leszek Błaszczyk, Marcin Ryczek, Bimolendu Das, Martyna Pluta, Magdalena Bejger, Kazuhiko Nakatani, **Agnieszka Kiliszek** **O-22**
Analiza strukturalna RNA powtórzeń G2C4 związanych ze stwardnieniem zanikowym bocznym i otępieniem czołowo-skroniowym: polimorfizm strukturalny RNA oraz jego potencjał do oddziaływania z syntetycznymi cząsteczkami
Instytut Chemii Biorganicznej PAN, Poznań
- 9:50 – 10:10** **Marta K. Dudek**, Maura Malińska, Agata Jeziorna, Piotr Paluch, Justyna Zając, Rafał Dolot **O-23**
An uneven fight with elusive polymorphs of meloxicam
Centre of Molecular and Macromolecular Studies, Polish Academy of Sciences, Łódź; Department of Chemistry, University of Warsaw
- 10:10 – 10:25** **Dawid Drozdowski**, Anna Gagor, Mirosław Mączka **O-24**
Two-dimensional hybrid perovskites with (110)-oriented layers and large octahedra tilting
Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, Wrocław
- 10:25 – 10:40** **Maria Książek**, Marek Weselski, Aleksandra Pórolniczak, Andrzej Katrusiak, Damian Paliwoda, Joachim Kusz, Robert Bronisz **O-25**
Pressure induced spin crossover in the two-dimensional coordination polymer of mixed crystals [Fe(bbtr)₃](BF₄)_{2x}(ClO₄)_{2(1-x)} (0 ≤ x ≤ 1)
Institute of Physics, University of Silesia, Chorzów; Faculty of Chemistry, University of Wrocław; Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University of Poznań; LCC, CNRS and University of Toulouse
- 10:40 – 10:55** **Kornel Roztocki** **O-26**
Unusual properties of flexible MOFs and their applicability in gas storage and separation
Adam Mickiewicz University, Poznań

- 11:00 – 13:00 **SESJA PLAKATOWA B / POSTER SESSION B**
- 13:00 – 15:00 **PRZERWA / BREAK**
- SESJA PLENARNA 5 / PLENARY SESSION 5**
- 15:00 – 15:20 **Maciej Kozak**, Tomasz Kołodziej, Joanna Sławek, Grzegorz Gazdowicz, Agnieszka Klonecka, Jarosław Wiechecki, Adriana Wawrzyniak **O-27**
SOLCRYS - PX beamline at SOLARIS NSRC - updated design and progress in construction
 SOLARIS National Synchrotron Radiation Centre, Jagiellonian University, Kraków; Department of Biomedical Physics, Faculty of Physics, Adam Mickiewicz University, Poznań; Faculty of Physics, Astronomy and Applied Computer Science, Jagiellonian University, Kraków; Doctoral School of Exact and Natural Sciences, Jagiellonian University, Kraków
- 15:20 – 15:35 **Anna A. Hoser**, Toms Rekis, Helena Butkiewicz, Karlis Berzins, Anders Ø. Madsen **O-28**
Revisiting the thermodynamics of phase transition in the jumping crystal L-pyroglutamic acid: insights from dynamic quantum crystallography and spectroscopy
 Faculty of Chemistry, University of Warsaw; Department of Pharmacy, Copenhagen University
- 15:35 – 15:45 **Svitlana Shishkina**, Anna Shaposhnik, Vitalii Rudiuk, Igor Levandovskiy **O-29**
New polymorphic modifications of 6-methyluracil: experimental and quantum chemical study for the practical use
 State Scientific Institution, "Institute for Single Crystals" of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv; Farmak JSC, Kyiv; National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute"
- 15:45 – 16:00 **Monika K. Krawczyk** **O-30**
Nietypowa faza w kryształ trifenilosilanolu jako wynik szybkiego chłodzenia (flash cooling)
 Instytut Fizyki Doświadczalnej, Uniwersytet Wrocławski
- 16:00 – 16:15 **Marcin Oszałka**, Anabel Berenice Gonzalez Guillen, Marlena Gryl, Wiesław Łasocho **O-31**
Solving a past conundrum – a peek into a class of carboxylic group-based molybdates
 Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków
- 16:15 – 16:30 **Wojciech Paszkowicz**, Hanna Dąbkowska, Tomasz Rygier **O-32**
Determination of iron distribution in inhomogeneous $\text{Ca}_3\text{CrFeGe}_3\text{O}_{12}$ garnet
 Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw; McMaster University, Brockhouse Institute for Materials Research, Hamilton; Warsaw University of Technology, Faculty of Materials Science and Engineering
- 16:30 – 16:45 **Iliia Smirnov**, Zbigniew Kaszukur, Armin Hoell **O-33**
Analysis of twinning in fcc nanoparticles by X-ray diffraction: a multidomain XRD approach
 Institute of Physical Chemistry PAS, Warsaw; Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie

- 16:45 – 17:00** **WRĘCZENIE DYPLOMÓW ZA NAJLEPSZE PREZENTACJE
PLAKATOWE – ZAKOŃCZENIE KONWERSATORIUM
GRANTING DIPLOMAS FOR THE BEST POSTER PRESENTATIONS –
CLOSING CEREMONY**
- 17:00** **WALNE ZEBRANIE SPRAWOZDAWCZE POLSKIEGO TOWARZYSTWA
KRYSTALOGRAFICZNEGO / GENERAL ASSEMBLY MEETING OF THE
POLISH CRYSTALLOGRAPHIC ASSOCIATION**