

66 Konwersatorium Krystalograficzne, 25-27 czerwca 2025 r.

Plan sesji plakatowych / Plan of the poster sessions

Sesja plakatowa A / Poster session A Czwartek, 26 czerwca 2025 r. godz. 17:00 – 18:30 Thursday, June 26, 2025, 17:00 – 18:30		
A-1	<u>Anna Zep</u> , Arkadiusz Ciesielski, Anna Sadocha, Kamila Pruszkowska, Anna Rosa, Katarzyna Gibuła, Michał K. Cyrański, Marta Zezula	Analiza strukturalna nowych form krystalicznych wybranych flawonoidów wykazujących zwiększoną rozpuszczalność
A-2	<u>Dominika Nielipińska</u> , Agnieszka Pietrzyk-Brzezińska, Maciej Nielipiński, Bartosz Sekuła, Edyta Gendaszewska-Darmach	Structural studies on TBC1D17, a crystal structure of the TBC domain and identification of its conserved motifs
A-3	<u>Maciej Nielipiński</u> , Agnieszka J. Pietrzyk-Brzezińska, Bartosz Sekuła	Connecting glutamate and arginine metabolism. structures of intermediate forms of N-acetylornithine-glutamate acetyltransferase
A-4	<u>Wojciech Nitek</u> , Ewa Żesławska, Agnieszka Kania, Henryk Marona, Anna M. Waszkielewicz	Structural analysis of some aminoalkanols salts
A-5	Chandrasekaran Prabakaran, Małgorzata Figiel, Roman H. Szczepanowski, Krzysztof Skowronek, Weronika Zajko, Vinuchakkaravarthy Thangaraj, Sebastian Chamera, <u>Elżbieta Nowak</u> , Marcin Nowotny	Structural and biochemical characterization of cauliflower mosaic virus reverse transcriptase
A-6	<u>Marta Orlikowska</u> , Katarzyna Kuncewicz, Marta Spodzieja, Sylwia Rodziewicz-Motowidło	Crystallization trials of signaling receptor HVEM with peptide inhibitor of HVEM/BTLA interaction
A-7	<u>Kinga Pokrywka</u> , Marta Grzechowiak, Joanna Śliwiak, Paulina Worsztynowicz, Joanna Loch, Mirosław Gilski, Mariusz Jaskólski	Structural insights into stable ligand complexes of class 3 L-asparaginase
A-8	<u>Mateusz Woźniak</u> , Anna Bujacz, Grzegorz Bujacz	Structural studies of psychrophilic MTA-phosphorylase in complexes with ligands
A-9	<u>Karolina Kałduńska</u> , Anna Kozakiewicz-Piekarz, Andrzej Wojtczak	Kompleksy żelaza(III) i miedzi(II) jako biomimetyki oksydaz katecholowych
A-10	<u>Anna Rosa</u> , Katarzyna Gibuła, Arkadiusz Ciesielski, Anna Sadocha, Michał K. Cyrański, Anna Zep, Marta Zezula	Zastosowanie metody UPLC-UV do badań rozpuszczalności i przenikalności nowych kokryształów genisteiny z koformarami zawierającymi pierścień pirydynowy
A-11	<u>Jan Dorna</u> , Andrzej Katrusiak, Szymon Sobczak	High pressure study on structure and properties of tris(pentafluorophenyl)borane, a paddle-wheel complex
A-12	<u>Alicja Prężyna</u> , Aleksandra Zwolenik, Anna Makal	X-ray structural analysis of unique polymorph of acetylene-gold(I)-phosphine under variable temperature and pressure conditions
A-13	<u>Piotr Reinhardt</u> , Roman Gajda, Magdalena Woińska, Jan Parafiniuk, Gerald Giester, Ronald Miletich, Yan Wu, Tomasz Poręba, Mohamed Mezouar, Szymon Sutuła, Tomasz Góral, Przemysław Dera, Krzysztof Woźniak	Symmetrization of strong hydrogen bond under high pressure in bihydroxide-ion-containing NaCu ₂ (SO ₄) ₂ ·H ₃ O ₂ revealed by experimental charge density and single crystal electron and neutron diffraction study
A-14	<u>Bugra Atam</u> , Ewa Patyk-Kaźmierczak	4,4'-Azopyridine and fumaric acid cocrystal under pressure

A-15	<u>Magdalena Wietrzyńska</u> , Rafał Bartoszewicz, Łukasz Przypis, Artur Herman, Jarosław Serafińczuk, Robert Kudrawiec	X-ray diffraction investigations of (TPM) ₂ SnI ₄ perovskite under hydrostatic pressure
A-16	Neda Heydari, <u>Anna Kozakiewicz-Piekarz</u> , Rahman Bikas	The effect of the position of the pyridine nitrogen on the coordination mode of hydrazone ligands
A-17	Neda Heydari, <u>Maja Mielcarz</u> , Anna Kozakiewicz-Piekarz, Rahman Bikas	Synthesis, crystal structure, and hirshfeld surface analysis of dinuclear zirconium complex
A-18	<u>Tadeusz M. Muzioł</u> , Julia Reszkowska	Synteza oraz badania strukturalne szczawianowych kompleksów chromu(III) z kationem proflawiny jako przeciwjonem
A-19	<u>Dawid Rafał Natkowski</u> , Karolina Wrochna, Paulina Halina Marek-Urban, Joanna Krzeszczakowska, Anna Makal, Krzysztof Durka	Korelacja struktura-luminescencja w grupie czterokoordynacyjnych kompleksów boru
A-20	<u>Kacper Paszczyk</u> , Katarzyna N. Jarzemska, Radosław Kamiński, Adam Krówczyński	Analiza właściwości fotoprzełączalnych solwatomorfu związku koordynacyjnego Pd(II) z grupą nitrową
A-21	<u>Emilia Sonsala</u> , Anna Świtlicka	Z kim przystajesz, takim się stajesz? – Wpływ liganda na właściwości strukturalne związków kobaltu(II)
A-22	<u>Zuzanna Spychalska</u> , Karolina Wrochna, Paulina Halina Marek-Urban, Krzysztof Durka	Co w borze szumi? Właściwości luminescencyjne i analiza oddziaływań międzycząsteczkowych pentacyklicznych kompleksów boru
A-23	<u>Waldemar Wysocki</u> , Zbigniew Karczmarzyk, Anna Kamecka	Badania strukturalne i spektroskopowe związków kompleksowych [Ru(H)(CO)(dtbbpy)(PPh ₃) ₂]PF ₆ oraz [Ru(H)(CO)(bq)(PPh ₃) ₂]PF ₆
A-24	<u>Patryk Borowski</u> , Radosław Kamiński, Katarzyna N. Jarzemska	Crystallographic insights into metal-metal bonding in square-planar Pd(II) and Pt(II) complexes
A-25	Tamara Bednarchuk, <u>Marta Brzezińska</u> , Katarzyna Helios	[NaSm(orotate) ₄ (H ₂ O) ₁₀]·3H ₂ O complex – crystal structure and vibrational spectra
A-26	<u>Piotr J. Bardziński</u> , Marek Weselski, Dagmara Kulesza, Paul D. Asimow, Jinping Hu, Stephen Armstrong, Daniel M. Silevitch, Thomas F. Rosenbaum, Roger R. Fu	Overview of the synthesis and structural characterization of quasicrystal-containing multi-phase alloys and single-grain icosahedral phases
A-27	Jolanta Darul, <u>Paweł Piszora</u>	Tetragonal LiMn ₂ O ₄ : facts and myths
A-28	<u>Magdalena Datta</u> , Patryk Nowak, Sebastian Demkowicz, Artur Sikorski, Janusz Rak	8-(4-trifluorometylotio)benzyloamino-2'-deoksyadenozyna: potencjalnie radiosensybilizująca pochodna
A-29	Leszek S. Litzbarski, Kamil Balcarek, Anna Bajorek, Tomasz Klimczuk, Michał J. Winiarski, <u>Karol Synoradzki</u>	Hexagonal polymorph of disordered Ce ₂ PdGe ₃ : magnetic and magnetocaloric properties
A-30	<u>Emilia Bronikowska</u> , Tadeusz Muzioł	Badania strukturalne kokryształów paracetamolu z 3,4,7,8-tetrametylo-1,10-fenantroliną
A-31	<u>Marcin S. Małecki</u> , Mateusz Janeta, Emilia Ganczar, Sławomir Szafert	Pochodne porfiryn z 1-haloalkinami jako prekursorzy do otrzymywania układów z wiązaniem XB
A-32	Joanna Nowicka-Scheibe, <u>Maja Morawiak</u>	Cocrystals of squaric acid with lutidines: a systematic study
A-33	<u>Przemysław Nowak</u> , Marcin Oszejca, Agata Jeziorna, Piotr Paluch, Marta K. Dudek	Meloxicam multicomponent crystal structures revealed by powder X-ray diffraction
A-34	<u>Patryk Nowak</u> , Artur Sikorski	Crystals of salicylidene Schiff bases: tautomerism and influence of carboxylic group position on the crystal packing
A-35	<u>Maurycy E. Nowak</u> , Arianna Lanza, Anders Ø. Madsen, Maura Malinska, Krystyna Syty, Marcin Modrzejewski, Anna A. Hoser	Form VI of Piracetam, the predicted yet elusive phase

A-36	<u>Gracjan Russ</u> , Tamás Holczbauer, Sourav De, Petra Bombicz, Andrzej Katrusiak, Szymon Sobczak	Piezo-solvatomorphism Of iHOFs – new organic porous framework
A-37	<u>Anna Sadocha</u> , Ilona Turowska-Tyrk, Michał K. Cyrański, Arkadiusz Ciesielski	Structural studies of urea clathrates with long aliphatic amines
A-38	<u>Mariia Shyshkina</u> , Elżbieta Wojaczyńska, Marek Daszkiewicz	S-(n-butylamino)thiourea derivative of 2-azabicycloalkane as an unexpected product of the guanylation reaction
A-39	<u>Amelia Stężalska</u> , Agata Białońska	Centro- i niecentrosymetryczna struktura krystaliczna pochodnej 1,2,4-triazolo-3-aminy
A-40	<u>Ewa Żesławska</u> , Wojciech Nitek, Waldemar Tejchman	Influence of the substituent on the architecture of the rings of 4-methyl-1,6-diphenyl-2[1H]-pyrimidinethione derivatives
A-41	<u>Sonia Steven Busigara</u> , Ewa Patyk-Kaźmierczak	High-pressure investigation of cocrystal based on 4,4'-azopyridine and diphenic acid
A-42	<u>Ewa Patyk-Kaźmierczak</u> , Michał Kaźmierczak	Tuning negative linear compressibility in 1,2-bis(4'-pyridyl)ethane cocrystals: a case study
A-43	<u>Mane Sahakyan</u> , Tamara Bednarchuk, Nelli Gharibyan, Ruzan Sukiasyan, Astghik Danghyan, Armen Atanesyan	The study of L-NNA-SSA and L-Lys-2SSA·3H ₂ O crystals
A-44	<u>Malwina Michałków</u> , Mateusz Janeta, Sławomir Szafert	Polimeryzacja katalityczna pochodnych 1-bromo-2-fenylacetylenu z użyciem soli palladu jako katalizatorów
A-45	<u>Michał Kaźmierczak</u> , Ewa Patyk-Kaźmierczak	How likely recrystallization solvents are to form solvates?
A-46	<u>Jacek Krawczyk</u>	Relation between changes in lattice parameter and primary crystal orientation of single-crystalline turbine blades
A-47	<u>Robert Paszkowski</u>	Rentgenowska metoda Bonda w analizie strukturalnej materiałów krystalicznych
A-48	<u>Michał Duda</u>	Badania wzorów z parkietów w Zamku Królewskim w Warszawie pod kątem symetrii w ujęciu krystalograficznym
A-49	<u>Tomasz Góral</u> , Szymon Sutula, Krzysztof Woźniak	Cryo-EM and ED are driving structural studies at the University of Warsaw
A-50	<u>Monika Hryniuk</u> , Maciej Witwicki	Gdzie krystalografia nie może, tam EPR pośle, czyli współpraca spektroskopii EPR i krystalografii w badaniu układu rodniowego
A-51	<u>Miłosz Huber</u> , Daniel M. Kamiński	Mikrostruktura i krystalochemia oliwinów w wybranych bazaltach tektonicznie aktywnych obszarów Europy: implikacje petrogenetyczne
A-52	Miłosz Huber, Urszula Maciołek, <u>Daniel M. Kamiński</u>	Krystalochemia i występowanie perowskitu i łoparytu w skałach ultrazasadowych-alkalicznych i karbonatytach jako potencjalnych rud pierwiastków ziem rzadkich (REE)
A-53	<u>Anna Mocarska</u> , Karolina Pioruńska, Marta Łaszcz, Agata Błazewicz	The role of XRPD in pharmaceutical authentication of illegal and falsified medicines
A-54	<u>Piotr Woźniak</u>	3D architecture of cobalt doped cerium oxide hierarchical catalyst
A-55	<u>Oskar Kaszubowski</u> , Patrycja Piękoś, Piotr Rejnhardt, Magdalena Rowińska, Daniel Tchoń	Sekcja Młodych Polskiego Towarzystwa Krystalograficznego: Polish Young Crystallographers

Sesja plakatowa B / Poster session B

Piątek, 27 czerwca 2025 r. godz. 9:00 – 10:30

Friday, June 27, 2025, 9:00 – 10:30

B-1	<u>Anna Ben</u> , Aleksandra Felczak, Michał Gacki, Elżbieta Bartoszak-Adamska, Lilianna Chęcińska	Enhancement of the antifungal activity of miconazole through the formation of molecular salts with pyrazine, pyridazine and pyrimidine derivatives
B-2	<u>Jakub Dąbrowski</u> , Karolina Gutmańska, Anna Dołęga	A novel Na/Ag risedronate, solid solutions: a promising therapeutic agent for bone disorders
B-3	<u>Valeryia Hushcha</u> , Lilianna Chęcińska	New crystal forms of tinidazole drug
B-4	<u>Natasza Jakubik</u> , Ewelina Zaorska, Maura Malinska	Enhancing the physicochemical properties of antidepressant drugs through cucurbituril complexation
B-5	<u>Jan Janczak</u>	Supramolecular chemistry of morpholine-functionalized zinc phthalocyanine
B-6	<u>Zbigniew Karcmarzyk</u> , Paweł Kozyra, Waldemar Wysocki, Monika Pitucha	The structure and conformation of novel phenoxyacetylthiosemicarbazides with potential anticancer activity
B-7	<u>Monika K. Krawczyk</u>	Struktura soli renianu(VII) z 1-adamantylaminą
B-8	<u>Magdalena Urbanowicz</u> , Marta Łaszcz, Karolina Pioruńska, Patrycja Chmielewska, Anna Mocarska, Ewelina Baran, Kulinowski Piotr	Analiza fizyko-chemiczna tabletek wydrukowanych techniką selektywnego spiekania laserowego
B-9	<u>Andrzej Żarczyński</u> , Marta Gaikowska, Dominika Jakubowska, Jakub Kubicki, Waldemar Maniukiewicz, Wojciech M. Wolf, Małgorzata I. Szykowska-Jóźwik	Analiza składu metodami PXRD & ICP-OES świeżego i zużytego preparatu stałego, stosowanego jako ogrzewacz ciała w turystyce zimowej
B-10	<u>Sabina W. Jaros</u> , Julia Fiszer, Chris H. J. Franco, Barbara Bażanów, Alexander M. Kirillov, Piotr Smoleński	New antiviral composite based on temperature-controlled self-assembled silver(I) coordination polymers
B-11	<u>Bartosz Cieśla</u> , Łukasz Ponikiewski, Agnieszka Pładzyk	Crystal structure of heteroleptic cadmium(II) tri-tert-butoxysilanethiolate with 2-aminepyridine
B-12	<u>Maciej Ejnik</u> , Łukasz Ponikiewski, Anna Dołęga	Nietypowe oddziaływanie aurofilowe w strukturze mieszanego-walentnego kompleksu Au(I)/Au(III) z 4-cyjanotiazolem
B-13	<u>Emilia Ganczar</u> , Agata Białońska	Structural diversity of copper(I) coordination compounds with halogenated triazole ligands
B-14	<u>Andrzej Kochel</u>	Nowe ligandy aminokarboksylowe
B-15	<u>Adrian Kowaliński</u> , Rafał Petrus	Synthesis of heterometallic rare-earth complexes using homometallic zinc precursors
B-16	<u>Dorota A. Kowalska</u> , Maciej Ptak, Szymon Smółka, Mariusz Stefański, Julia Osmólska, Damian Szymański, Adam Sieradzki	Impact of ligand substitution in 2-fluoroethylammonium cadmium chlorobromide
B-17	<u>Marta Kubiak</u> , Mateusz Janeta, Sławomir Szafert	Synteza oraz analiza struktury krystalicznej fenylosilsekwioksanu funkcjonalizowanego grupą –C ₂ TMS
B-18	<u>Anna Kwiecień</u> , Anna Pyra	Struktura krystaliczna dwurdzeniowego kompleksu miedzi z hemiaminalem
B-19	<u>Alona Luba-Onufriichuk</u> , Oleksii Pavlyuk	Synthesis and structural peculiarities of Cu(I) chloride complex with 1-methyl-1-allylpiperidinium
B-20	<u>Karolina Matuszak</u> , Rafał Petrus	Heterometallic alkali metal – magnesium/zinc/calcium aryloxides based on double-opened dicubane core structure

B-21	<u>Karol Wydra</u> , Katarzyna Ślepokura, Janusz Gregoliński, Jerzy Lisowski	Conformational diversity of a chiral [3+3] amine macrocycle in its coordination compounds
B-22	<u>Magdalena N. Rowińska</u> , Tamara J. Bednarchuk, Jan K. Zaręba, Anna Piecha-Bisiorek, Anna Gągor	Phase transitions and reversible thermochromism in hybrid (butylammonium) ₃ [BiI ₆]
B-23	<u>Aleksandra Krupińska</u> , Bogumiła Burzyńska, Vasyl Kinzhybalo, Błażej Dziuk, Przemysław Szklarz, Dariusz Kajewski, Jan Zaręba, Ada Drwęcka, Szymon J. Zelewski, Piotr Durlak, Piotr Zieliński, Paweł Sobieszczczyk, Ryszard Jakubas, Anna Piecha-Bisiorek	Ferroelektryczność, piezoelektryczność i ferroelastyczność w grupie chloro-, bromo- i jodoantymonianów(III) acetamidyniowych o stechiometrii R ₃ M ₂ X ₉
B-24	<u>Andrii Pyrih</u> , Roman Lesyk, Mariusz Jaskolski, Andrzej Gzella	2-(4-methoxyphenyl)amino/imino-1,3-selenazol-4(5H)-one: a case of concomitant polymorphs
B-25	<u>Weronika Luiza Ziółek</u> , Katarzyna Ślepokura	Dehydratacja kryształów soli disodowej 5'-monofosforanu guanozyny, Na ₂ (GMP)·4H ₂ O
B-26	<u>Karolina Bukata</u> , Vasyl Kinzhybalo, Katarzyna Ślepokura	Amonowe sole podwójne kwasu hypodifosforowego
B-27	<u>Michał Gacki</u> , Anna Pietrzak, Wojciech Wolf	Synthesis and crystal structure of copper levocetirizine derivative
B-28	Adrianna Szmulewicz, <u>Mateusz Gołdyn</u> , Artur Stefankiewicz	The influence of substituents on structural diversity in azobenzene derivatives functionalized with symmetrically substituted amino acid molecules
B-29	<u>Aleksandra Deptuch</u> , Marcin Kozieł, Marcin Piwowarczyk, Magdalena Urbańska, Ewa Juszyńska-Gałązka	Niskotemperaturowe badania strukturalne szkła fazy smektycznej C _A *
B-30	<u>Marcin Ziobro</u> , Rafał Janicki	Wpływ promienia jonowego Ln(III) na trwałość układów trójskładnikowych typu Ln(III)-L-L'
B-31	<u>Elżbieta Bartoszak-Adamska</u> , Mateusz Gołdyn, Weronika Nowak, Magdalena Nowicka, Oliwia Grupa	Polymorphism in selected multicomponent systems composed of caffeine and benzene-1,2,4,5-tetracarboxylic acid
B-32	<u>Julia Bilakiewicz</u> , Agata Białońska	Polimeryczne układy srebra(I) z zasadą Schiffa opartą na 1,2,4-triazolo-4-aminie
B-33	<u>Oliwia Bobińska</u> , Kinga Wzgarda-Raj	Rentgenowska analiza strukturalna kokryształów pirazyny
B-34	<u>Iwona Bryndał</u> , Anna Pyra	Synteza i struktura nowych pochodnych 4-(benzyloamino)-2-fenilo-6-metylopirymidyny o potencjalnych właściwościach przecinowotworowych
B-35	<u>Karolina Cichocka</u> , Magdalena Ceborska, Magdalena Zimnicka, Karolina Kędra	Salts of pyrimethamine and aminobenzoic acids – synthesis, structural characterization and thermal analysis
B-36	<u>Przemysław Szklarz</u> , Anna Gągor, Anna Piecha, Grażyna Bator, Ryszard Jakubas	Ferroic and semiconducting properties of selected hybrid iodoantimonates (III) and iodobismuthates (III)
B-37	Ewa Wieczorek-Dziurla, Leonid A. Shemchuk, Dmitry A. Lega, Andrii Pyrih, <u>Andrzej K. Gzella</u>	Badania wpływu struktury przeciwjonów na sieć wiązań wodorowych w kryształach soli złożonych z trietyloaminy i pochodnych 2,2-dioksydu 2,1-benzotiazyny i 1,2-benzoksatiiny
B-38	<u>Zofia Hajdaczuk</u> , Agata Białońska, Emilia Ganczar	Struktury krystaliczne związków koordynacyjnych srebra(I) z pochodną 1,2,4-triazolo-4-aminy
B-39	Elżbieta Łastawiecka, <u>Anna E. Koziół</u>	Prosta synteza fosfodekalonów za pomocą reakcji Dielsa-Aldera wspomaganej mikrofalami
B-40	<u>Marta S. Krawczyk</u>	Solvatomorfizm soli kwasu fenamowego z pirymetaminą
B-41	<u>Kamil Krzemiński</u> , Anna Hoser, Maura Malińska, Marta Dudek, Izabela Madura	Badania różnorodności faz krystalicznych metacetamolu

B-42	<u>Maria Książek</u> , Piotr Kuś, Joachim Kusz, Marcin Rojkiewicz	Struktury krystaliczne wybranych pochodnych katynonów
B-43	<u>Olga Książkiewicz</u> , Marcin Palusiak, Kinga Wzgarda-Raj	Wieloskładnikowe układy krystaliczne z merkaptopirydynami – synteza i charakterystyka
B-44	Maria Książek, Piotr Kuś, <u>Joachim Kusz</u>	Oddziaływania C–Br...Br w wybranych bromopochodnych benzenowych oraz naftalenowych
B-45	<u>Alexis Leborgne</u> , Gabin Gbabode, Anna Hoser	Investigation of the crystallization behavior of propylammonium salts derived from (RS)- and (S)-Chlocyphos
B-46	Jarosław Sukiennik, Katarzyna Gobis, Izabela Korona-Głowniak, Andrzej Fruziński, Andrzej Olczak, Małgorzata Szczesio	Structures and activity of picolinohydrazonamides derivatives
B-47	<u>Anna Pietrzak</u> , Silvia Cappeli, Wojciech M. Wolf	Positioning of a hydrogen atom in intramolecular hydrogen bond: neutron and X-ray diffraction studies
B-48	<u>Daniel Mariusz Tchoń</u> , Stef Smeets, Lukáš Palatinus	Generalizing Instamatic data collection framework for electron crystallography
B-49	<u>Patryk Czapnik</u> , Angelika Adamus-Grabicka, Małgorzata Domagała, Elżbieta Budzisz, Magdalena Małecka	Analysis of interactions for chromone analogues condensed with 1,2,3-triazole by energy framework, QTAIM and NCI calculations
B-50	<u>Natalia Mikłuszka</u> , Aneta Jezierska	Zastosowanie metod chemii obliczeniowej w badaniach polimorfizmu pochodnych tiazolowych zasad Schiffa: rola swobody rotacyjnej i oddziaływań niekowalencyjnych
B-51	<u>Szymon Sobczak</u>	A new high-pressure phase of <i>N</i> -butanol and its structural relationship with the low-temperature structure
B-52	<u>Uzeru Haruna Kun</u> , Ewelina Ksepko	XRD analysis of carbon-based materials for syngas production via the gasification process
B-53	<u>Szymon Sutula</u> , Tomasz Góral, Krzysztof Woźniak	Electron diffraction studies at cryomicroscopy and electron diffraction core facility
B-54	<u>Łukasz Cieszyński</u> , Joanna Krzeszczakowska, Anna Makal	Applicability of Hirshfeld atom refinement for establishing the nature of chemical bonds