

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

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

- |               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |            |
|---------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 9:00 – 9:30   | <b>OTWARCIE KONWERSATORIUM / OPENING CEREMONY</b><br><b>Wręczenie nagród laureatom 6. Olimpiady Krystalograficznej</b><br><b>Award ceremony for the winners of the 6<sup>th</sup> Crystallographic Olympiad</b><br><b>Ogłoszenie wyników konkursów Diamenty 2023 oraz 2024</b><br><b>Announcement of the results of the Diamonds 2023 and 2024 competitions</b><br><br><b>SESJA REFERATÓW 1 / ORAL PRESENTATIONS 1</b> |            |
| 9:30 – 10:00  | <b><u>Grzegorz Bujacz</u></b> , Kajetan Duszyński, Anna Bujacz<br><b>Struktury krystaliczne ptasich i ssaczych surowiczych albumin</b><br>Instytut Biotechnologii Molekularnej i Przemysłowej, Politechnika Łódzka                                                                                                                                                                                                     | <b>R-1</b> |
| 10:00 – 10:20 | <b><u>Krzysztof Brzeziński</u></b><br><b>A closer look at molecular mechanisms underlying inhibition of S-adenosyl-L-homocysteine hydrolase by transition metal cations</b><br>Department of Structural Biology of Prokaryotic Organisms, Institute of Bioorganic Chemistry, Polish Academy of Sciences                                                                                                                | <b>R-2</b> |
| 10:20 – 10:40 | <b><u>Maura Malińska</u></b><br><b>Advancing protein structure and ligand binding studies with quantum crystallography</b><br>Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski                                                                                                                                                                                                                                                   | <b>R-3</b> |
| 10:40 – 11:00 | <b><u>Bartosz Sekuła</u></b> , Maciej Nielipiński, Agnieszka Pietrzyk-Brzezińska<br><b>Arginine metabolism as a molecular target for herbicide development</b><br>Institute of Molecular and Industrial Biotechnology, Faculty of Biotechnology and Food Sciences, Lodz University of Technology                                                                                                                       | <b>R-4</b> |

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

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

|               |                                                                                                                                                                                                                                                                                          |      |
|---------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|
| 9:00 – 10:30  | <b>SESJA PLAKATOWA B / POSTER SESSION B</b>                                                                                                                                                                                                                                              |      |
| 10:30 – 10:45 | <b>PRZERWA / BREAK</b>                                                                                                                                                                                                                                                                   |      |
|               | <b>SESJA REFERATÓW 4 / ORAL PRESENTATIONS 4</b>                                                                                                                                                                                                                                          |      |
| 10:45 – 11:05 | <b><u>Svitlana Shishkina</u></b> , Olexander Shalimov<br><b>Competition of strong hydrogen bonds as a reason for the concomitant polymorphs formation</b><br>State Scientific Institution, Institute for Single Crystals, NAS of Ukraine; Institute of Organic Chemistry, NAS of Ukraine | R-17 |
| 11:05 – 11:25 | <b><u>Anna Makal</u></b><br><b>Triethylphosphine: a ‘molecular gear’ enabling SCSC phase transitions</b><br>University of Warsaw, Faculty of Chemistry, Biological and Chemical Research Centre                                                                                          | R-18 |
| 11:25 – 11:45 | <b><u>Oskar Kaszubowski</u></b> , Katarzyna Ślepokura<br><b>Nucleotide crystal structure landscape exploration in the light of dehydration</b><br>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- $\pi$ ,  $\pi$ - $\pi$  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 | <b><u>Adrian Kowaliński</u></b> , Rafał Petrus<br><b>Synthesis of heterometallic rare-earth complexes using homometallic zinc precursors</b><br>Faculty of Chemistry, Wrocław University of Science and Technology                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | M-6  |
| 16:30 – 16:40 | <b><u>Bartosz Cieśla</u></b> , Łukasz Ponikiewski, Piotr Bruździak, Zbigniew Hnatejko, Renata Łyszczek, Agnieszka Pladzyk<br><b>Wpływ podstawników w pierścieniu pirazynowym na strukturę i właściwości heteroleptycznych silanotiolanów cynku(II) i kadmu(II)</b><br>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 | <b><u>Karolina Matuszak</u></b> , Rafał Petrus<br><b>Heterometallic alkali metal – magnesium/zinc/calcium aryloxides based on double-opened dicubane core structure</b><br>Wrocław University of Science and Technology, Faculty of Chemistry                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | M-8  |
| 16:50 – 17:00 | <b><u>Pablo Martinez-Bulit</u></b><br><b>Crystal structure exploration – I didn't know Mercury could do that</b><br>The Cambridge Crystallographic Data Centre                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | M-9  |
| 17:00 – 17:10 | <b><u>Daniel Mariusz Tchoń</u></b> , Stef Smeets, Lukáš Palatinus<br><b>Generalizing instamatic data collection framework for electron crystallography</b><br>Institute of Physics, Czech Academy of Sciences; Netherlands eScience Centre                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | M-10 |
| 17:10 – 17:25 | <b>PRZERWA / BREAK</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |      |
| 17:25         | <b>WRĘCZENIE NAGRÓD / AWORD CEREMONY</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |      |