

Komitet Krystalografii PAN
Polskie Towarzystwo Krystalograficzne
Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN

67 Konwersatorium Krystalograficzne

Polish Crystallographic Meeting

Warsztaty Naukowe PTKryst

Sesja Naukowa Młodych Krystalografów PTKryst

Wrocław, 24-26 VI 2026



<https://konkryst.intibs.pl/>



67 Konwersatorium Krystalograficzne

Warsztaty Naukowe PTKryst i Sesja
Sekcji Młodych Krystalografów PTKryst

24 VI – 26 VI 2026 r.

Program
Streszczenia komunikatów
Lista uczestników i autorów prac

Organizatorzy:
Polska Akademia Nauk
Komitet Krystalografii PAN
Polskie Towarzystwo Krystalograficzne
Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu



Komitet
Krystalografii



Sponsorzy Konwersatorium:



Konferencja dofinansowana ze środków na upowszechnianie nauki programu „Otwarta Nauka” Polskiej Akademii Nauk.

Komitet Organizacyjny:

Marek Daszkiewicz – przewodniczący, Vasyl Kinzhybalo – zastępca przewodniczącego,
Dorota Kowalska – sekretarz, Izabela Madura, Anna Gagor, Tamara Bednarchuk,
Magdalena Rowińska, Amelia Stężalska, Dawid Drozdowski, Ewa Bukowska,
Oleksandr Korolevych, Mariia Shyshkina

Redakcja:

Tamara Bednarchuk, Dorota Kowalska, Magdalena Rowińska

Wydawca:

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, Wrocław
oraz Komitet Krystalografii PAN

ISBN 978-83-966642-7-3

Tematyka Konwersatorium obejmuje badania podstawowe i stosowane dotyczące idealnej i realnej struktury kryształów prowadzone za pomocą promieniowania rentgenowskiego uzyskiwanego zarówno tradycyjnymi metodami jak i w synchrotronach, badania przy użyciu neutronów i elektronów, zagadnienia symetrii, przemian fazowych i wzrostu kryształów, nowe metody badawcze i obliczeniowe oraz wszelkie inne aspekty krystalografii. Konwersatorium stanowi forum wymiany poglądów wszystkich polskich krystalografów.

Ilustracja na okładce: Logo jubileuszu 60-lecia INTiBS PAN oraz logo 70-lecia Konwersatorium Krystalograficznego wyk. E. Cichos, modyfikacja za zgodą autorki M. Daszkiewicz.
Zdjęcie prof. W. Trzebiatowskiego z archiwum INTiBS PAN.

Projekt i wykonanie okładki: M. Daszkiewicz, na podstawie projektu M. Wołczyra okładki 64 edycji konferencji.

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

Środa, 24 czerwca 2026 r. / Wednesday, June 24, 2026

- 10:00 – 13:15 **WARSZTATY NAUKOWE PTKryst / PCrA WORKSHOP** **W**
**Fantastyczne cząsteczki i jak je wyszukiwać za pomocą narzędzi
CCDC / Fantastic molecules and how to search for them using CCDC
tools**
Ilaria Gimondi, Andy Peel, Fabio Montisci, Izabela Madura
The Cambridge Crystallographic Data Centre, Politechnika Warszawska
- 14:00 – 18:00 **WYCIECZKA RIGAKU/
RIGAKU FACTORY TOUR**
- 15:00 – 21:00 **SESJA NAUKOWA SEKCJI MŁODYCH KRYSTALOGRAFÓW** **M**
**POLSKIEGO TOWARZYSTWA KRYSTALOGRAFICZNEGO /
SCIENTIFIC SESSION OF THE YOUNG CRYSTALLOGRAPHERS
SECTION OF THE POLISH CRYSTALLOGRAPHIC ASSOCIATION**

Czwartek, 25 czerwca 2026 r. / Thursday, June 25, 2026

- 9:00 – 9:30 **OTWARCIE KONWERSATORIUM / OPENING CEREMONY**
SESJA REFERATÓW 1 / ORAL PRESENTATIONS 1
- 9:30 – 10:15 **Mariusz Jaskólski** **R-1**
New paradigm for nucleic acid structure validation
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
- 10:15 – 10:45 **Andrii Hultiaiev, Žan Zakošek, Evgeny Goreshnik** **R-2**
**Investigation of CuX – HX – polyamine systems (X=Cl, Br)
using two-dimensional composition diagrams**
Jožef Stefan Institute
- 10:45 – 11:15 **Kamil Filip Dziubek, Matteo Ceppatelli, Marta Morana, Demetrio Scelta,** **R-3**
**Manuel Serrano-Ruiz, Adhara Baldassarre, Enrico Berretti, Andrew B.
Cairns, Konstantin Glazyrin, Roberto Bini, Maurizio Peruzzini**
**Pressure evolution of electronic and crystal structure in group 15
elements**
Universität Wien
- 11:15 – 11:40 **PRZERWA / BREAK**

SESJA REFERATÓW 2 / ORAL PRESENTATIONS 2

- 11:40 – 12:00 **Andrzej Katrusiak** R-4
High-pressure polymorphs stabilized at ambient conditions
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
- 12:00 – 12:10 **Szymon Sobczak**, Paulina Ratajczyk, Lucia Maini, Andrzej Katrusiak R-5
High-pressure structural transformations and optoelectronic response of perylene diimide semiconductors
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
- 12:10 – 12:30 **Damian Paliwoda**, Livia Getzner, Yasmine Remili, Laure Vendier, Saioa R-6
Cobo, Gábor Molnár, Azzedine Bousseksou
High-pressure crystallographic studies of spin crossover compounds: unraveling coupled structural and spin–state transitions
European Spallation Source ERIC
- 12:30 – 12:40 **Andrzej Nowok**, Anna Gagor, Szymon Sobczak, Adam Sieradzki R-7
When temperature activates and pressure fails to order: fresh perspective on cage-cation disorder in hybrid compounds
Politechnika Wrocławska
- 12:40 – 13:00 **Agnieszka M. Janiak** R-8
Water uptake and breathing behaviour in hydroxylated trianglimine crystals
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
- 13:00 – 13:20 **Wojciech Stawski** R-9
Hoops, cages and sandwiches: from a crystallographic playground to exploring new functional materials
Ulm University

13:20 – 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
- 15:20 – 15:40 **Patryk Wróbel** R-11
Nowoczesne metody analizy struktury i faz materiałów: rozwiązania XRD oferowane przez firmę SCANMAT i LANScientific
SCANMAT Sp. z o.o.
- 15:40 – 16:00 **Marcin Sadłowski**, Piotr Jakiela, Jerzy Czachórski R-12
Oprogramowanie High Score Plus – zastosowanie funkcji sferycznych w modelowaniu złożonych przypadków uprzywilejowanej orientacji
Malvern Panalytical B.V. Sp. z o.o. Oddział w Polsce
- 16:00 – 16:10 **Kamil Urbański** R-13
Możliwości badawcze XRD poza warunkami otoczenia
Anton Paar Poland

- 16:10 – 16:30 **Michał Czaja** R-14
illuminating the future - Nowa generacja systemów do dyfrakcji pojedynczych kryształów (SC-XRD) firmy Bruker
 Labsoft Sp. z o.o.
- 16:30 – 16:40 **Andrzej Wojtas** R-15
Prezentacja dyfraktometrów firmy PROTO Manufacturing
 PROTO Manufacturing Europe Sp. z o.o. / METLAB Sp. z o.o.
- 16:40 – 17:00 **Sebastian Wroński** R-16
Laboratorium zaawansowanych technik rentgenowskich (LAXT-AGH): nowa platforma do wielotechnikowej charakteryzacji materiałów
 Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
- 17:00 – 19:00 **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, 26 czerwca 2026 r. / Friday, June 26, 2026

- 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 **Maciej Nielipiński**, Agnieszka Joanna Pietrzyk-Brzezińska, Bartosz Sekuła R-17
Which metal should I bind? Metal-binding, structure and function of arabidopsis thaliana acetylornithine deacetylase
 Politechnika Łódzka
- 11:05 – 11:15 **Svitlana Shishkina**, Igor Ukrainets R-18
Unusual enantiomeric crystal forms of *N*-cycloalkyl-4-methyl-2,2-dioxo-1*H*-2λ⁶,1-benzothiazine-3-carboxamides and their biological activity
 Institute of Organic Chemistry NAS of Ukraine
- 11:15 – 11:35 **Chris H. J. Franco** R-19
Pyrimidine-based antimicrobial platforms: from uracil functionalization to silver(I)-mediated bioactivity
 Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
- 11:35 – 11:45 **Ireneusz Buganski**, Stanislav Vrtnik, Radosław Strzałka, Andreja Jelen, Sandra Drev, Janusz Wolny, Nobuhisa Fujita R-20
Rare-earth based icosahedral quasicrystals with lithium
 Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

- 11:45 – 11:55 **Maciej Żak**, Radosław Strzałka R-21
Data reduction of F-type icosahedral quasicrystal
Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
- 11:55 – 12:15 **Daniel M. Kamiński**, Arkadiusz Matwijczuk, Klaudia Rząd, Andrzej R-22
Górecki, Radosław Zaleski
Nowy hybrydowy kryształ organiczno-halogenkowy: charakterystyka wzrostu i właściwości scyntylacyjne
Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska
- 12:15 – 12:35 **Anna Gagor** R-23
Structural flexibility and phase behaviour of hybrid molecular metal halides
Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
- 12:35 – 12:45 **Dorota A. Kowalska**, Vasyl Kinzhybalo, Jakub Wojciechowski, Vladyslav R-24
Maliuzhenko, Katarzyna Ślepokura
Unravelling the local structure in silver hypodiphosphate with 3D ED
Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
- 12:45 – 13:00 **WRĘCZENIE DYPLOMÓW ZA NAJLEPSZE PREZENTACJE
PLAKATOWE – ZAKOŃCZENIE KONWERSATORIUM
GRANTING DIPLOMAS FOR THE BEST POSTER PRESENTATIONS –
CLOSING CEREMONY**
- 15:00 – 17:00 **WALNE ZEBRANIE 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, 24 czerwca 2026 r. / Wednesday, June 24, 2026

- 15:00 – 15:10 OTWARCIE SESJI / OPENING CEREMONY
- 15:10 – 15:20 **Kacper Paszczyk**, Vitali Stsiapura, Kinga Potempa, Radosław Kamiński, Katarzyna N. Jarzemska, Alice Brink **M-1**
Korelacja struktury i właściwości spektroskopowych płasko-kwadratowych dikarbonylowych kompleksów rodu(I)
Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego
- 15:20 – 15:30 **Amelia Stężalska**, Adam Kabański, Tamara J. Bednarchuk **M-2**
Wpływ sieci wiązań wodorowych na fotoluminescencję hybrydowego halogenku cyny(IV)
Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski / Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu
- 15:30 – 15:40 **Zofia Hajdaczuk**, Agata Białońska **M-3**
Struktury krystaliczne związków koordynacyjnych srebra(I) z pochodną 1,2,4-triazolo-4-aminy z zasadą Schiffa
Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski
- 15:40 – 15:50 **Maciej Żak**, Radosław Strzałka **M-4**
Data reduction of F-type icosahedral quasicrystal
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie
- 15:50 – 16:00 **Marta Krause**, Radosław Strzałka **M-5**
Badania ikozaedrycznej stałej sieci w układach ZnMgRE za pomocą dyfrakcji proszkowej
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie
- 16:00 – 16:10 **Andrzej Nowok**, Maciej Płak, Dorota Kowalska, Adam Sieradzki **M-6**
Persistent structural disorder and its consequences: new paradigms for hybrid organic-inorganic functional materials
Katedra Fizyki Doświadczalnej Politechniki Wrocławskiej

- 16:10 – 16:20 **Dawid Drozdowski**, Adam Kabański, Katarzyna Fedoruk-Piskorska, Oleksandr Korolevych, Anna Gagor **M-7**
Chemical puzzles: how the choice of organic cations governs the inorganic substructure of hybrid lead halides
 Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu
- 16:20 – 16:35 **PRZERWA / BREAK**
- 16:35 – 16:45 **Zuzanna Szypryt**, Agnieszka Skórska-Stania, Michał Duda **M-8**
Badania strukturalne wybranych halogenkowych kompleksów metali z pochodnymi aniliny
 Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie
- 16:45 – 16:55 **Sylwia Zięba**, Christelle Kadlec, Adam Mizera, Elena Buixaderas, Miroslav Lebeda, Petr Ondrejko, Jirka Hlinka, Petr Kužel **M-9**
Compression-driven transformation of the helical hydrogen-bond structure in imidazolium hydrogen o-phthalate
 Instytut Fizyki Czeskiej Akademii Nauk w Pradze oraz Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk w Poznaniu
- 16:55 – 17:05 **Karolina Matuszak**, Rafał Petrus **M-10**
Synthesis and structural studies on heterometallic alkali metal-group 13 aryloxides and their application as catalysts in chemical recycling of polycaprolactone
 Wrocław University of Science and Technology, Faculty of Chemistry
- 17:05 – 17:15 **Monika Hryniuk**, Maciej Witwicki **M-11**
Krystalografia i EPR vs niesparowany elektron
 Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego
- 17:15 – 17:25 **Jacek Sawka**, Alina Bieńko, Maciej Witwicki, Barbara Machura, Pavel Kopel, Cyril Rajnák, Roman Boča **M-12**
Jak przyciągać do siebie atrakcyjne kryształy? Korelacja struktury i anizotropii magnetycznej
 Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego
- 17:25 – 17:35 **Adrian Kowaliński**, Rafał Petrus, Piotr Sobota **M-13**
Magnesium-rare earth alkoxides for immobilization of nuclear waste
 Wydział Chemiczny Politechniki Wrocławskiej
- 17:35 – 17:45 **Magdalena Rowińska**, Tamara J. Bednarchuk, Anna Gagor **M-14**
From structure to functional optical properties – designing hybrid materials through crystallographic control
 Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu
- 17:45 – 18:00 **PRZERWA / BREAK**
- 18:00 **WRĘCZENIE NAGRÓD / AWARD CEREMONY**

SESJA NAUKOWA
SEKCJI MŁODYCH KRYSTALOGRAFÓW PTKryst
SCIENTIFIC SESSION OF THE PCrA
YOUNG CRYSTALLOGRAPHERS SECTION

M-1

KORELACJA STRUKTURY I WŁAŚCIWOŚCI SPEKTROSKOPOWYCH PŁASKO-KWADRATOWYCH DIKARBONYLOWYCH KOMPLEKSÓW RODU(I)

**Kacper Paszczyk¹, Vitali Stsiapura¹, Kinga Potempa¹, Radosław Kamiński¹,
Katarzyna N. Jarzemska¹, Alice Brink²**

¹ Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, ul. Żwirki i Wigury 102,
02-089 Warszawa

² Department of Chemistry, University of the Free State, Bloemfontein 9301,
South Africa

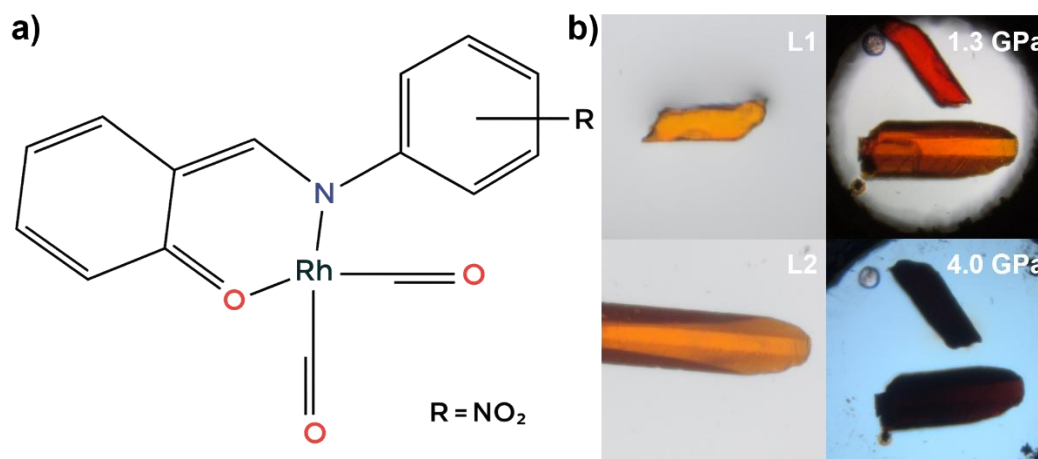
Kompleksy metali przejściowych mogą wykazywać interesujące właściwości fotofizyczne, które w stanie stałym są często silnie zależne od oddziaływań międzycząsteczkowych, w tym oddziaływań metalofilowych [1,2]. Celem projektu było zbadanie dwóch nowych dikarbonylowych kompleksów rodu(I) z ligandem typu zasady Schiffa zawierających grupę nitrową w pozycji para (L1) oraz meta (L2) (Rys. 1a).

Związek L1 krystalizuje w grupie przestrzennej $P\bar{1}$, a obniżenie temperatury nie powoduje jakościowych zmian struktury. Z kolei L2 w temperaturze pokojowej krystalizuje w grupie $P2_1/c$, a w jego strukturze krystalicznej można wyróżnić kolumny stabilizowane oddziaływaniami $\pi - \pi$ oraz metalofilowymi ($Rh \cdots Rh$). Poniżej temperatury około 240 K obserwuje się zróżnicowanie odległości $Rh \cdots Rh$ między cząsteczkami w kolumnach, a w konsekwencji obniżenie symetrii do $P\bar{1}$. Odległości między atomami metalu, zarówno w dimerach dla L1, jak i w stosach dla L2, są krótsze od sumy promieni van der Waalsa.

Pomiary absorpcji UV-Vis wykonane dla monokryształów w temperaturze pokojowej i ciśnieniu atmosferycznym wykazały, że pasmo absorpcji związku L2 jest przesunięte ku czerwieni względem L1 oraz wykazuje zależność od polaryzacji światła (~530 nm). Efekt ten można wiązać z obecnością jednowymiarowych motywów strukturalnych stabilizowanych oddziaływaniami metalofilowymi. Badania absorpcji przeprowadzono również dla monokryształów obu związków umieszczonych w kowadełkach diamentowych. Zaobserwowano wyraźne przesunięcie pasm absorpcyjnych ku czerwieni, czemu towarzyszyła zmiana barwy kryształów z pomarańczowej na czarną (Rys. 1b).

Planowane są dalsze badania, obejmujące pomiary dyfrakcji rentgenowskiej kryształów w warunkach wysokiego ciśnienia oraz obliczenia teoretyczne, które pozwolą na bardziej szczegółową analizę zależności między właściwościami spektroskopowymi, a strukturą badanych kompleksów.

M-1



Rys. 1. a) Schematyczne przedstawienie badanych związków. b) Badane kryształy na szkiełku mikroskopowym oraz w komorze diamentowej podczas badań absorpcji UV-VIS.

Literatura

- [1] J. Slinker, D. Bernards, P. Houston, H. Abruña, S. Bernhard, G. Malliaras, *Chem. Commun.* 9 (2003) 2392.
- [2] V. Syamala, P. Borowski, L. Bosman, K. Potempa, D. Paliwoda, K. Korona, P. Łaski, R. Kamiński, D. Kama, A. Roodt, A. Brink, K. Jarzemska, *J. Mater. Chem.*, **13** (2025) 15634–15644.

WPLYW SIECI WIĄZAŃ WODOROWYCH NA FOTOLUMINESCENCJĘ HYBRYDOWEGO HALOGENKU CYNIV

Amelia Steżalska^{1,2}, Adam Kabański¹, Tamara J. Bednarchuk¹

¹ *Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, ul. Okólna 2,
50-422 Wrocław*

² *Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski, ul. F. Joliot Curie 14, 50-383 Wrocław*

Organiczno-nieorganiczne hybrydy halogenków metali stanowią obiekt intensywnych badań ze względu na potencjalne zastosowania w optoelektronice. Szczególną uwagę przyciągają układy 0D oparte na ołowiu (Pb^{2+}), charakteryzujące się wysoką wydajnością kwantową fotoluminescencji, dużymi współczynnikami absorpcji oraz szerokopasmową emisją [1]. Ze względu na wysoka toksyczność ołowiu poszukuje się alternatyw opartych na pierwiastkach o podobnej konfiguracji elektronowej. Materiały hybrydowe zawierające jony Ge^{2+} i Sn^{2+} wykazują jednak ograniczoną stabilność ze względu na podatność na utlenianie [2], podczas gdy cyna(IV) charakteryzuje się wysoką stabilnością chemiczną, znacznie niższą toksycznością oraz dużą dostępnością.

Pomimo tych zalet, hybrydy bazujące na halogenkach Sn^{4+} często nie wykazują emisji w temperaturze pokojowej lub charakteryzują się niską intensywnością fotoluminescencji. W celu aktywacji emisji stosuje się domieszkowanie jonami o konfiguracji walencyjnej ns^2 , takimi jak Bi^{3+} , Sb^{3+} [3,4] czy Te^{4+} [5].

Otrzymano niedomieszkowane kryształy $(\text{C}_4\text{H}_7\text{N}_2\text{O})_2\text{SnCl}_6$, gdzie $\text{C}_4\text{H}_7\text{N}_2\text{O}$ to kation 4(5)-(hydroksymetylo)imidazoliowy, których strukturę scharakteryzowano metodami SXRD i PXRD. Pomiary fotoluminescencji w zakresie 80–300 K wykazały intensywną niebieską emisję w temperaturze pokojowej pod wpływem promieniowania UV o długości fali 365 nm. Obecność rozbudowanej sieci wiązań wodorowych może wskazywać na istotną rolę oddziaływań supramolekularnych w stabilizacji stanów emisyjnych typu self-trapped exciton (STE).

Literatura

- [1] M. Mączka, D. Drozdowski, D. Stefańska, A. Gagor, *Inorg. Chem. Front.*, **10** (2023) 7222–7230.
- [2] T. Zhu, Y. Yang, X. Gong, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **12** (2020) 26776–26811.
- [3] B. Su, G. Song, M. S. Molokeev, Z. Lin, Z. Xia, *Inorg. Chem.*, **59** (2020) 9962–9968.
- [4] M. Ren, Y. Wang, S. Zhang, J. Yao, B. Zou, R. Zeng, *Inorg. Chem.*, **63** (2024) 24410–24420.
- [5] L. Zhou, S. Zhou, X. Liu, J. Ma, T. Zhang, K. Li, Y. Chang, W. Shen, M. Li, R. He, *Inorg. Chem.*, **63** (2024) 10335–10345.

M-3

STRUKTURY KRystaliczne ZWIĄZKÓW KOORDYNACYJNYCH SREBRA(I) Z POCHODNĄ 1,2,4-TRIAZOLO-4-AMINY Z ZASADĄ SCHIFFA

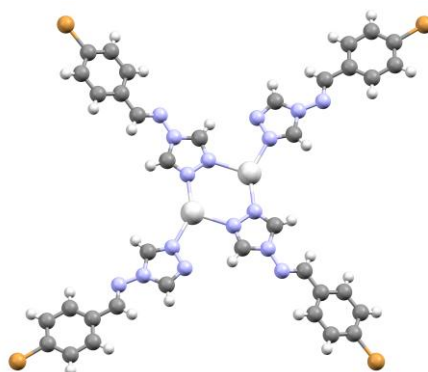
Agata Białońska, Zofia Hajdaczuk

Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego, F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

Znaczny potencjał koordynacyjny triazoli umożliwia tworzenie związków w postaci krystalicznej o zróżnicowanej budowie i właściwościach [1,2]. Z tego powodu związki koordynacyjne pochodnych 1,2,4-triazolo-4-aminy cieszą się sporym zainteresowaniem. We wcześniejszych latach opisano, w szerokim zakresie, struktury krystaliczne związków koordynacyjnych miedzi(I) z pochodnymi 1,2,4-triazolo-4-aminy z zasadą Schiffa oraz ich zdolność do wymiany cząsteczek gościa [3,4]. Materiały porowate związków koordynacyjnych, które wykazują takie właściwości, znajdują szerokie zastosowanie w katalizie heterogenicznej [5], separacji i magazynowaniu gazów [6], rozdziale molekularnym [7].

Celem przeprowadzonych badań było otrzymanie krystalicznych związków koordynacyjnych charakteryzującymi się obecnością, w swoich strukturach krystalicznych, dużych kanałów, które pozwalałyby na potencjalną wymianę cząsteczek gościa oraz zbadanie budowy tych struktur. W tym celu wykorzystano tetrafluoroboran srebra(I) oraz *N*-[(*E*)-(4-bromofenylo)metylideno]-4*H*-1,2,4-triazolo-4-aminę (**4BrPhatrz**), które rozpuszczano razem w acetonitrylu, metanolu lub etanolu, w różnych stosunkach molowych, i pozostawiano do krystalizacji przez powolne odparowanie rozpuszczalnika.

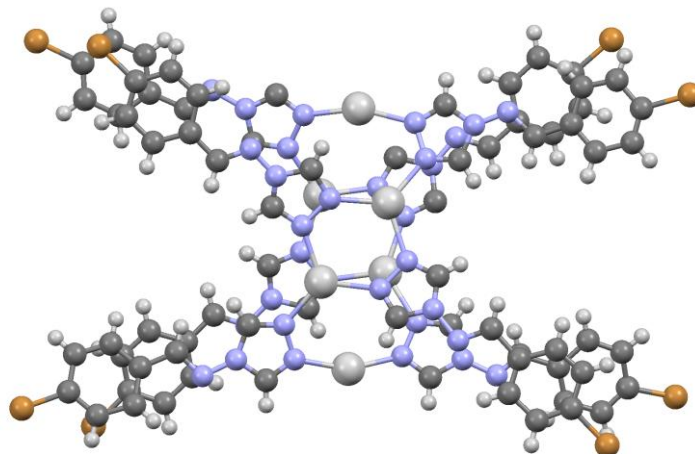
W wyniku reakcji otrzymano kilka różnych struktur krystalicznych zawierających luki, kanały jedno- lub dwuwymiarowe. Ich wspólną cechą jest dwurdzeniowa jednostka koordynacyjna $[Ag_2(4BrPhatrz)_4]^{2+}$ (**Rysunek 1**), w której kationy srebra(I) są połączone poprzez dwa ligandy 4BrPhatrz mostkowo. 4BrPhatrz koordynuje do Ag(I) również monodentnie. Determinuje to, że jednostka koordynacyjna przybiera kształt litery X.



Rys. 1. Rysunek dwurdzeniowej jednostki koordynacyjnej $[Ag_2(4BrPhatrz)_4]^{2+}$.

M-3

Oprócz wyżej opisanych struktur otrzymano również m. in. sześciordzeniowy związek koordynacyjny (**Rysunek 2**), którego budowa zostanie przybliżona na moim wystąpieniu.



Rys. 2. Rysunek sześciordzeniowej jednostki koordynacyjnej $[Ag_6(4BrPhatrz)_8]^{6+}$.

Literatura

- [1] G. Aromí, L. A. Barrios, O. Roubeau, P. Gamez, *Chem. Rev.*, **255** (2011) 485.
- [2] J. G. Haasnoot, *Coord. Chem. Rev.*, **200-202** (2000) 131.
- [3] K. Drabent, Z. Ciunik, *Cryst. Growth Des.*, **9** (2009) 3367.
- [4] A. Białońska, K. Drabent, B. Filipowicz, M. Siczek, *Cryst. Eng. Comm.*, **15** (2013) 9859.
- [5] J. Y. Lee, O. K. Farha, J. Roberts, K. A. Scheidt, S. T. Nguyen, J. T. Hupp, *Chem. Soc. Rev.*, **38** (2009) 1248.
- [6] M. P. Suh, H. J. Park, T. K. Prasad, D.-W. Lim, *Chem. Rev.*, **112** (2012) 782.
- [7] H. Wu, R. S. Reali, D. A. Smith, M. C. Trachtenberg, J. Li, *Chem.–Eur. J.*, **16** (2010) 13951.

M-4

DATA REDUCTION OF F-TYPE ICOSAHEDRAL QUASICRYSTAL

Maciej Żak, Radosław Strzałka

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, AGH w Krakowie

In my presentation, I will give an overview of how to perform a complete process of XRD data treatment of an icosahedral quasicrystal single-crystalline sample using CrysAlis^{Pro} software provided by Rigaku. The procedure involves a hand-selection of icosahedral reciprocal space vector basis, indexation of diffraction reflections' positions, and integration of reflections' intensities using the RED module of CrysAlis^{Pro}. Diffraction pattern of icosahedral quasicrystals can only be indexed with a 6D vector basis, which requires non-standard analysis in diffraction analysis. CrysAlisPro is a unique (and the only one) tool that enables the complete diffraction analysis of aperiodic crystals [1].

We focused on the icosahedral system of ZnMgRE (RE={Y,Tb,Dy,Ho,Er,Tm}) family with F-type centering of a 6D unit cell and Bergman-type atomic clusters in the atomic structure. This system is particularly interesting in search of magnetism of Bergman-type quasicrystals [2,3]. Recently, a detailed analysis of the influence of the RE element on structural disorder in this system was performed [4] (see a poster by R. Strzałka *et al.*), to which project my analysis contributed. The samples were prepared by I. Bugański using a self-flux method, and the XRD data were collected by J. Kusz using an Agilent SuperNova diffractometer with an Atlas CCD detector. The measurement was carried out at 100 K with a Mo lamp.

The CrysAlis^{Pro} software was shared by Rigaku upon request.

Literature

- [1] Rigaku Oxford Diffraction (2023). CrysAlisPro (Version 1.171.42.84a) [Computer software]. Rigaku Corporation, Oxford, UK. <https://rigaku.com/products/crystallography/x-ray-diffraction/crysalispro>.
- [2] S. Vrtnik et al., Non-ergodic states in icosahedral quasicrystals Zn-Mg-RE (RE = Tm, Er, Ho) (2025), conference contribution; S. Vrtnik, et al., Magnetic properties of Bergman-type icosahedral Zn-Mg-Tm quasicrystals (2025), conference contribution.
- [3] I. Buganski et al., *Acta Cryst. B*, **82** (2026) 175.
- [4] R. Strzałka, M. Żak, I. Bugański, J. Wolny, *in preparation*.

M-5

BADANIA IKOZAEDRYCZNEJ STAŁEJ SIECI W UKŁADACH ZnMgRE ZA POMOCĄ DYFRAKCJI PROSZKOWEJ

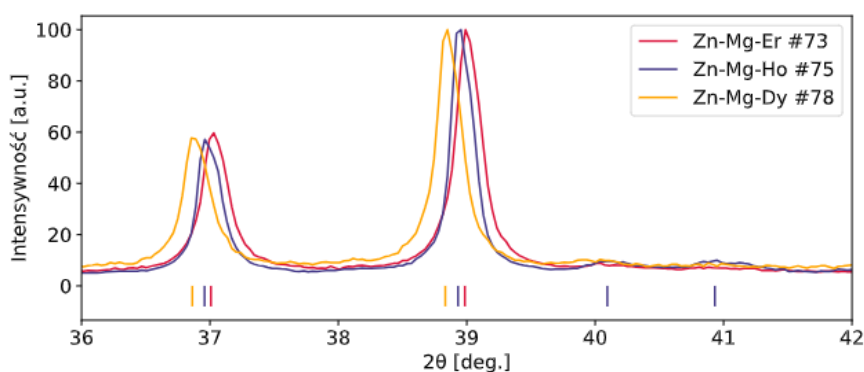
Marta Krause, Radosław Strzałka

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie, al. Adama Mickiewicza 30, 30-059 Kraków

Wystąpienie ma na celu szczegółowe przedstawienie wyników badań strukturalnych nad kwazikryształami ikozaedrycznymi wytworzonymi w układach trójskładnikowych Zn-Mg-RE (RE = Er, Dy, Ho) o typie P centrowania sześciowymiarowej komórki elementarnej [1].

Głównym narzędziem badawczym wykorzystanym w pracy była metoda proszkowej dyfrakcji rentgenowskiej (XRD). Pozwoliła ona na przeprowadzenie precyzyjnej analizy porównawczej wpływu rodzaju zastosowanego lantanowca na parametry strukturalne oraz stabilność fazy ikozaedrycznej. W przeciwieństwie do kryształów klasycznych, opis kwazikryształów wiąże się ze znacznie wyższym stopniem złożoności, co wymusza rezygnację z tradycyjnych metod opisu w przestrzeni trójwymiarowej. W pracy zastosowano podejście nadwymiarowe, które polega na opisie struktury w przestrzeni sześciowymiarowej [2]. Metoda ta umożliwiła wyznaczenie ikozaedrycznych stałych sieciowych badanych stopów, co pozwoliło na rzetelną ocenę zależności między promieniem atomowym domieszki a geometrią sieci kwazikryształicznej.

Wyniki badań potwierdziły założenia teoretyczne dotyczące struktury analizowanych układów [3]. Zaobserwowano istotną zależność między stałymi sieciowymi fazy ikozaedrycznej a promieniem atomowym lantanowców: wzrost promienia atomowego lantanowca powodował proporcjonalne zwiększenie ikozaedrycznej stałej sieciowej układu (Wykres 1.).



Wykres 1. Porównanie dyfraktogramów (znormalizowanych względem najwyższego refleksu) wraz z zaznaczonymi pozycjami refleksów dyfrakcyjnych dla próbek w przedziale 2θ od 36 do 42 stopni.

Istotnym elementem analizy była weryfikacja czystości fazowej otrzymanych próbek. Interpretacja dyfraktogramów wykazała obecność refleksów faz wtórnych, w szczególności fazy Lavesa $MgZn_2$, współistniejącej z fazą główną.

Literatura

- [1] I. Buganski, S. Vrtnik, A. Jelen, J. Luzar, R. Strzalka, J. Wolny, J. Kusz, N. Fujita, The Ammann–Kramer–Neri tiling model of a P-ZnMgEr Bergman-type quasicrystal based on in-house X-ray diffraction. *Acta Cryst. B*, **82**(2) (2026) 175–178. <https://doi.org/10.1107/S205252062600003X>
- [2] W. Steurer, S. Deloudi, (2009). *Crystallography of Quasicrystals: Concepts, Methods and Structures* (Vol. 126). Springer Science & Business Media.
- [3] I. Buganski, S. Vrtnik, R. Strzalka, A. Jelen, S. Drev, J. Wolny, N. Fujita, Primitive icosahedral quasicrystals in ZnMgLi(Dy, Ho, Er, Tm) systems. *Acta Cryst. A*: **82**(2) (2026) 108–117. <https://doi.org/10.1107/S205327332501099X>

PERSISTENT STRUCTURAL DISORDER AND ITS CONSEQUENCES: NEW PARADIGMS FOR HYBRID ORGANIC-INORGANIC FUNCTIONAL MATERIALS

Andrzej Nowok¹, Maciej Ptak², Dorota Kowalska², Adam Sieradzki¹

¹ Department of Experimental Physics, Wrocław University of Science and Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław

² Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław, Poland

The relationship between crystal structure and molecular dynamics in hybrid organic–inorganic halides plays a central role in determining their physical properties. While these materials are often described as ordered at low temperatures, many exhibit significant dynamic behavior associated with the motion of organic cations in the high-temperature phases. The resulting combination of long-range structural order and molecular motion leads to rich lattice dynamics, which play a key role in processes such as polaron formation or enhancement of light-to-energy conversion efficiency [1-4]. Additionally, the presence of polar, reorientable cations allows these materials to actively respond to external electric fields [5]. Namely, the polar species can realign despite thermal fluctuations typically observed in diffraction studies, giving rise to orientational polarization and dielectric relaxation. Recent studies, however, have revealed exceptions to this conventional behavior. A roaring example constitutes the one-dimensional hybrid halide, aminoguanidinium lead iodide, which undergoes a first-order phase transition at 400/369 K (upon heating/cooling) to a low-temperature monoclinic $C2/c$ phase in which the motion of the organic aminoguanidinium (AGA^+) cation is not fully suppressed [6].

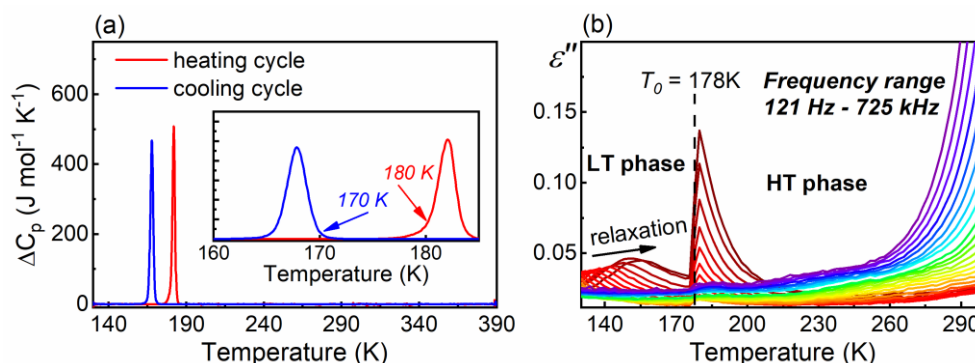


Fig. 1. (a) Thermograms revealing a low-temperature phase transition in $((H_3O)(FEA)_2BiBr_6)$. (b) Temperature dependence of the imaginary part of the complex dielectric permittivity with clear signatures of the phase transition and low-temperature relaxation dynamics.

In this work, we introduce a new lead-free hybrid halide $((H_3O)(FEA)_2BiBr_6)$, which exhibits an even more unconventional behavior. This compound adopts a dynamically disordered high-temperature $C2/c$ phase and undergoes a first-order phase transition at 170/180 K with the formation of a low-temperature structure, where structural disorder is retained (Fig. 1a). Unlike typical order–disorder transitions, this

M-6

process involves significant conformational changes of FEA^+ cations rather than their complete ordering. Dielectric measurements supported by quantum DFT computations reveal additionally that molecular dynamics of the small structural building blocks (FEA^+ and/or water) persist in the low-temperature phase (Fig. 1b). The associated relaxation times increase dramatically (from microseconds to thousands of seconds) with decreasing temperature, eventually entering the timescale characteristic for freezing of the motion. This behavior represents a continuous crossover from dynamic to static disorder without an additional structural transition. As a result, $(\text{H}_3\text{O})(\text{FEA})_2\text{BiBr}_6$ combines long-range crystalline order with persistent local disorder, either dynamic or static depending on temperature.

These findings demonstrate that persistent disorder is not an isolated case but may represent a broader phenomenon in hybrid materials. Importantly, the presence of persistent disorder enables dielectric relaxation even at low temperatures and provides a pathway for continuous tuning of optoelectronic properties. This work thus introduces a new framework for understanding and designing functional hybrid systems.

The research was supported by the Polish high-performance computing infrastructure PLGrid (HPC Centers: ACK Cyfronet AGH), with computational resources provided under grant no. PLG/2025/018625, which A.N. gratefully acknowledges.

Literature

- [1] D. Meggiolaro, F. Ambrosio, E. Mosconi, A. Mahata, F. De Angelis, *Adv. Ener. Mater.*, **10** (2020) 1902748.
- [2] J. Ma, L.-W. Wang, *Nano Lett.*, **17** (2017) 3646–3654.
- [3] J. Ma, L.-W. Wang, *Nano Lett.*, **15** (2015) 248–253.
- [4] F. Ambrosio, J. Wiktor, F. De Angelis, A. Pasquarello, *Energy Environ. Sci.*, **11** (2018) 101–105.
- [5] A. Nowok, S. Sobczak, K. Roszak, A. Z. Szeremeta, M. Mączka, A. Katrusiak, S. Pawlus, F. Formalik, A. J. B. dos Santos, W. Paraguassu, A. Sieradzki, *Nat. Commun.*, **15** (2024) 7571.
- [6] A. Nowok, M. Mączka, A. Gaęor, M. Ptak, J. K. Zaręba, D. Szewczyk, S. Palai, A. Sieradzki, *Chem. Mater.*, **36** (2024) 6588–6597.

CHEMICAL PUZZLES: HOW THE CHOICE OF ORGANIC CATIONS GOVERNS THE INORGANIC SUBSTRUCTURE OF HYBRID LEAD HALIDES

**Dawid Drozdowski¹, Adam Kabański¹, Katarzyna Fedoruk-Piskorska²,
Oleksandr Korolevych¹, Anna Gaĝor¹**

¹*Institute of Low Temperature and Structure Research Polish Academy of Sciences,
Okólna 2, 50-422 Wrocław*

²*Wrocław University of Science and Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370
Wrocław, Poland*

Hybrid organic-inorganic lead halides have become one of the hottest material families in modern chemistry, largely because of their remarkable light-emitting and solar energy harvesting properties. However, the most studied, three-dimensional (3D) variants are notoriously sensitive to moisture and air, limiting their real-world use. This has pushed researchers toward lower-dimensional relatives — think of it as going from a fully connected 3D LEGO brick structure to flat, layered 2D sheets. These layered systems confine electrons more effectively, boosting light emission efficiency and offering new ways to tune optical properties [1,2].

What makes this especially exciting is that the organic molecules sitting between the inorganic layers are not just passive spacers — they actively direct how the inorganic framework assembles and, consequently, how the material emits light [3,4]. By selecting different organic cations, we can access entirely new inorganic architectures beyond classical perovskite layers, such as ribbon-like or cage-like arrangements of lead-bromide octahedra. We exploited this design principle to synthesize several new hybrid lead bromides, each incorporating two distinct organic cations (Figure 1). Some compounds adopt a never-before-reported 2D framework built from octahedral ribbons linked by bridging octahedra, while others are assembled into a corrugated layer geometry. Together, these examples illustrate that choosing the right organic cation is not just a chemical detail — it is the key design variable that unlocks new inorganic architectures and optical functionalities.

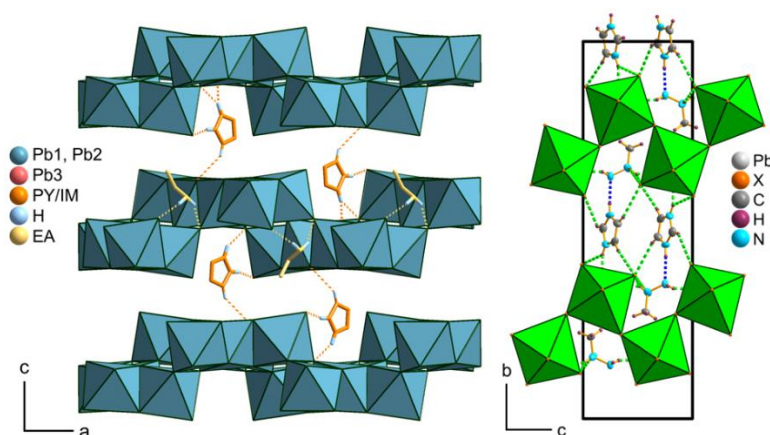


Figure 1. Layered hybrid lead bromides with two distinct organic cations: representative structural examples.

M-7

This research was funded by the Polish National Science Centre (project No. 2023/49/N/ST5/00521).

Literature

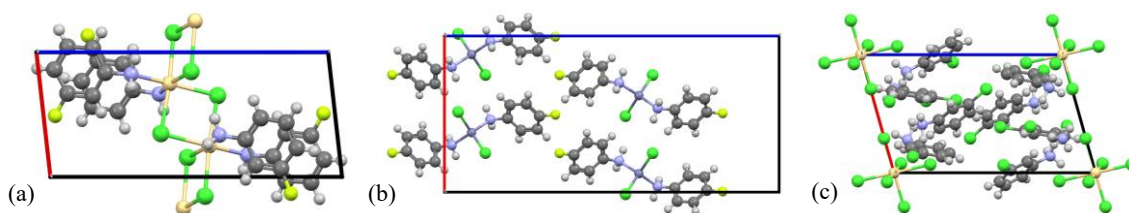
- [1] T.-H. Han, K. Y. Jang, Y. Dong, et al., *Nat. Rev. Mater.*, **7** (2020) 757.
- [2] B. Kang, F. Yan, *Energy Environ. Sci.* **18** (2025) 3917.
- [3] K. Wang, J. Y. Park, Akriti, L. Dou, *EcoMat* **3** (2021) e12104.
- [4] D. Drozdowski, K. Fedoruk, A. Kabański, M. Maczka, A. Sieradzki, A. Gagor, *J. Mater. Chem. C* **11** (2023) 4907.

BADANIA STRUKTURALNE WYBRANYCH HALOGENKOWYCH KOMPLEKSÓW METALI Z POCHODNYMI ANILINY

Zuzanna Szypryt, Agnieszka Skórska-Stania, Michał Duda

*Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie,
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków*

Otrzymano serię halogenkowych kompleksów metali z halogenowymi pochodnymi aniliny. Kompleksy otrzymano przy użyciu dwóch metod: klasycznej syntezy z roztworów oraz metody mechanochemicznej. Syntezę z roztworów prowadzono w mieszaninie dwóch rozpuszczalników (w układzie alkoholowo-wodnym) w podwyższonej temperaturze. W podejściu mechanochemicznym reakcje prowadzono przez ucieranie reagentów z niewielką ilością rozpuszczalnika lub bez jego udziału, w zależności od stanu skupienia zastosowanej pochodnej aniliny. W obu przypadkach stosunek molowy aminy do soli metalu wynosił 2:1.



Rys. 1. Typy struktur badanej rodziny połączeń halogenków metali z pochodnymi aniliny dotychczas zdeponowanych w bazie danych strukturalnych CSD (Cambridge Structural Database): (a) polimer koordynacyjny o kodzie NOJPOT [1] (typ I^1O^0 [2]), (b) kryształ molekularny o kodzie QEBSAT [3], (c) brak połączenia między atomem metalu i aminą w strukturze TESZAS [4]. Struktury zwizualizowano przy użyciu programu Mercury w wersji 3.8 z 2016 roku [5].

Badania strukturalne otrzymanych połączeń przeprowadzono przy użyciu metody dyfrakcji monokrystalicznej lub proszkowej wyznaczając wartości parametrów sieciowych, układ krystalograficzny oraz grupę przestrzenną, w tym określając obecność lub brak środka symetrii w strukturze, co jest istotne w kontekście projektowania materiałów wykazujących nieliniowe właściwości optyczne (SHG).

Literatura

- [1] M. Ben Nasr, E. Aubert, E. Espinosa, F. Lefebvre, C. Ben Nasr, *J. Mol. Struct.*, **1082** (2015) 162–169.
- [2] A. K. Cheetham, C. N. R. Rao, R. K. Feller, *Chem. Commun.*, **46** (2006) 4780–4795.
- [3] A. Subashini, K. Ramamurthi, H. Stoeckli-Evans, *Acta Cryst.*, **68** (2012) 1152.
- [4] B. Wagner, S. A. Warda, M. A. Hitchman, D. Reinen, *Inorg. Chem.*, **35** (1996) 3967.
- [5] C. F. Macrae, I. J. Bruno, J. A. Chisholm, P. R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, L. Rodriguez-Monge, R. Taylor, J. van de Streek and P. A. Wood, *J. Appl. Cryst.*, **41** (2008) 466–470.

COMPRESSION-DRIVEN TRANSFORMATION OF THE HELICAL HYDROGEN-BOND STRUCTURE IN IMIDAZOLIUM HYDROGEN *O*-PHTHALATE

**Sylwia Zięba^{1,2}, Christelle Kadlec¹, Adam Mizera², Elena Buixaderas¹,
Miroslav Lebeda^{1,3}, Petr Ondrejko¹, Jirka Hlinka¹, Petr Kužel¹**

¹ *Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Na Slovance 1999/2,
182 00 Prague 8, Czech Republic*

² *Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Sciences, M. Smoluchowskiego 17,
60-179 Poznan, Poland*

³ *Faculty of Mechanical Engineering, Czech Technical University in Prague,
Technická 4, 166 07 Prague 6, Czech Republic*

Hydrogen-bonded organic frameworks (HOFs) are a new class of porous materials with unique dynamic properties that have attracted considerable interest due to their potential applications in areas such as optics and information storage [1]. These materials are composed of organic molecules or ions that are linked by hydrogen bonds (HBs), which determine their behaviour under different thermodynamic conditions, such as temperature or pressure. Understanding the underlying mechanisms is therefore crucial for designing more efficient organic materials [2,3]. Organic compounds such as imidazole, pyrazole and triazole are used as building blocks for these systems due to their environmentally friendly properties [2].

To comprehend the physical processes occurring in such materials when subjected to temperature or pressure changes, one must first grasp the proton-lattice and the proton-phonon coupling [4]. As Huang et al. (2023) proposed [2], efficient proton transfer can occur in conjunction with phonons. Notably, the OH and NH stretch regions in vibrational spectra contain information regarding anharmonicities and the dynamics of HBs and their microscopic environments [5], which can be profitably investigated through experimental analysis using vibrational spectroscopy. Changes in HBs within molecules can be detected without measuring their length, thanks to spectroscopic methods. Significant changes in structural, optical and electronic behaviours, including fundamental properties rarely observed under ambient conditions, can be induced by applying mechanical pressure.

A unique helical structure is formed under ambient conditions by ions being connected by $N^+ - H \cdots O^-$ HBs in a molecular system called imidazolium hydrogen *o*-phthalate (OrtImi). It is also a proton conductor with a maximum specific electrical conductivity value of 10^{-3} S/cm [6]. There is a weak van der Waals force between the layers of benzene and imidazole rings, which makes the molecules pack tightly together and gives the crystal a stable structure. This presentation looks at changes in the way ions are arranged, as seen using different types of spectroscopy at low temperatures and high pressures. Changes in the parameters of the most important bands were identified. We carried out the analysis of the observed changes in the studied system by involving quantum chemistry calculations. We performed these calculations using density functional theory (DFT) and molecular dynamics within the machine-learning interatomic potential framework methods.

M-9

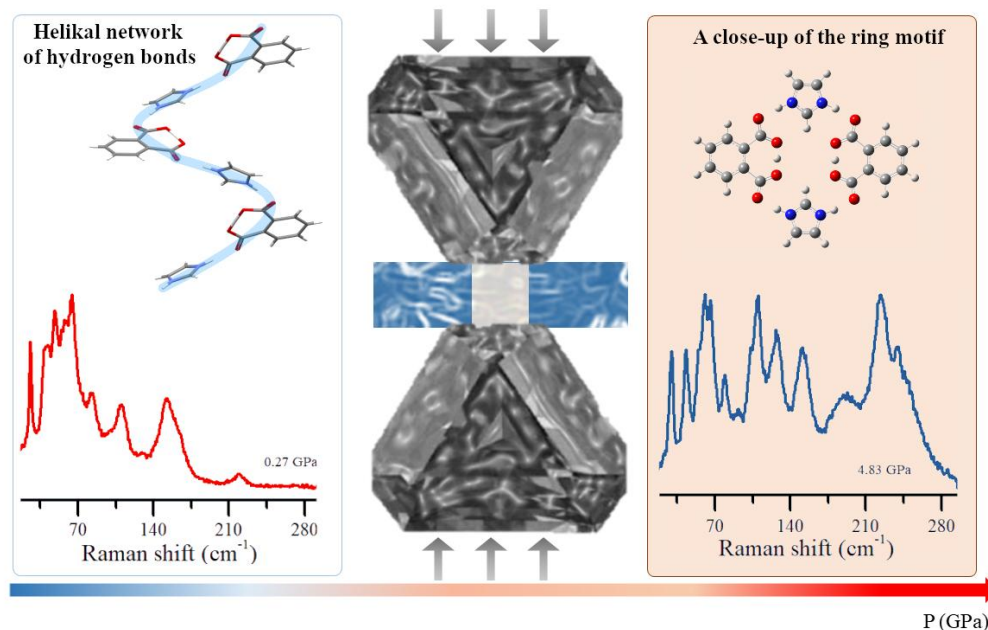


Fig. 1. A pressure-induced transition in the hydrogen bonding pattern of imidazolium hydrogen *o*-phthalate, changing them from a helical structure to a close-up of the ring motif.

Using a broad range of spectroscopic methods (THz, IR, Raman) and density functional theory and molecular dynamics computational analysis within the machine-learning interatomic potential framework, we assessed the behavior of vibrational modes of imidazolium hydrogen *o*-phthalate (OrtImi) under variable temperature and hydrostatic pressure and deduced its consequences for the general physical properties of the system [7]. We found that the helical network formed by $N^+-H\cdots O^-$ and $O\cdots H\cdots O^-$ HBs and its evolution under pressure plays a leading role. Namely, a pressure-induced phase transition above 3 GPa is observed, where the helical HB network changes into a close-up ring structure. Furthermore, we demonstrated that decreasing the temperature results in proton ordering in HBs below 150 K, which makes conditions conducive to proton-phonon coupling favorable. These findings provide a promising basis for developing pressure-sensitive materials with a switchable proton conductivity.

Acknowledgements: The research was financed as a research project under the “BEKKER NAWA 2024” program (The Polish National Agency for Academic Exchange, BPN/BEK/2024/1/00125/U/00001). This research was carried out with the support of the Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling at the University of Warsaw (ICM UW).

Literature

- [1] Y. Lv, J. Liang, Z. Xiong, X. Yang, Y. Li, H. Zhang, S. Xiang, B. Chen, Z. Zhang, *Adv. Mater.*, **36** (2024) 2309130.
- [2] Y. Huang, J. L. Gottfried, A. Sarkar, G. Zhang, H. Lin, S. Ren, *Nat. Commun.*, **14** (2023) 5041.
- [3] A. J. Thompson, B. S. K. Chong, E. P. Kenny, J. D. Evans, J. A. Powell, M. A. Spackman, J. C. McMurtrie, B. J. Powell, J. K. Clegg, *Nat. Mater.*, **24** (2025) 356–360.
- [4] H. Matsui, K. Shimatani, Y. Ikemoto, T. Sasaki, Y. Matsuo, *J. Chem. Phys.*, **152** (2020) 154502.
- [5] K. Ishii, S. Takeuchi, T. Tahara, *J. Chem. Phys.*, **131** (2009) 044512.
- [6] S. Zięba, A. Dubis, P. Ławniczak, A. Gzella, K. Pogorzelec-Glaser, A. Łapiński, *Electrochim. Acta*, **306** (2019) 575–589.
- [7] S. Zięba, C. Kadlec, A. Mizera, E. Buixaderas, M. Lebeda, P. Ondrejko, J. Hlinka, P. Kužel, *J. Phys. Chem. Lett.*, **17** (2026) 5266.

M-10

SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDIES ON HETEROMETALLIC ALKALI METAL-GROUP 13 ARYLOXIDES AND THEIR APPLICATION AS CATALYSTS IN CHEMICAL RECYCLING OF POLYCAPROLACTONE

Karolina Matuszak, Rafal Petrus

*Wroclaw University of Science and Technology, Faculty of Chemistry, 23 Smoluchowskiego,
50-370 Wroclaw*

Over the past five decades, there has been an increasing interest in the synthesis of novel group 13 complexes for their unique structural chemistry and catalytic applications. Within this group, heterometallic alkali metal-group 13 derivatives are particularly attractive for their use in organic synthesis and polymerization reactions [1,2]. For instance, the gallium–lithium Shibasaki catalyst, [GaLi((binol-CH₂)₂O)], has been successfully applied in the enantioselective ring-opening of *meso*-epoxides, yielding 1,2-diol monoethers (94% yield, 96% enantioselectivity). Similarly, the chiral lithium–aluminum binaphthoxide complex, [AlLi(binol)₂], has proven to be a highly efficient catalyst for asymmetric transformations, including the 1,4-addition of Horner–Wadsworth–Emmons reagents to enones, Michael additions, and tandem Michael–aldol reactions. In addition, lithium–indium complexes supported by dianionic fluorinated dialkoxy-diimino salen-like ligands have demonstrated excellent activity in the ring-opening polymerization of *rac*-lactide, achieving 99% conversion of *rac*-LA within 0.5 h. A notable characteristic of these heterometallic systems is their superior catalytic performance compared with the corresponding homometallic trivalent group 13 analogues, highlighting the beneficial synergistic effects arising from the cooperative interaction between the alkali metal and group 13 metal centers [3].

Today, the most common method of synthesis in this class of compounds involves the use of organometallic or halide group 13 reagents and alkali metal aryloxides with O,O'-donor ligands. At the moment, group 13-lithium aryloxides are poorly studied with the number of structures limited to 34 for Al-Li, 7 for Ga-Li, and 6 for In-Li. In coordination chemistry, heterometallic aluminum–lithium aryloxides usually form dinuclear or tetranuclear compounds with an Al : Li ratio of 1 : 1, whereas gallium/indium–lithium complexes usually form tetranuclear clusters.

Therefore, the aim of this work was a synthesis and structural analysis of lithium-group 13 aryloxides [AlLi₃(sal-Me)₆] (**1**), [InLi₃(sal-Me)₆] (**2**), and [Ga₆Li(sal-Me)₆(OMe)₁₂]Cl (**3**) (where Hsal-Me = methyl salicylate) for their use as catalysts in chemical recycling of poly(caprolactone) (PCL).

PCL is a biodegradable petroleum-derived polyester widely used in packaging, films, carry bags, pouches, trays, reusable dishes, 3D printing, and other fields. It belongs to the group of compounds which cannot undergo mechanical recycling due to low melting point (60°C) and sensibility to hydrolytic degradation. Therefore, significant research efforts have focused on the chemical recycling of PCL through depolymerization of plastic waste into monomers or other chemical intermediates, which can be converted into value-added products or repolymerized into polymers.

M-10

The comparison of alkali metal-group 13 complexes' structures and catalytic activity with homometallic counterparts (Al, Ga, In, Li) in chemical recycling of PCL is planned as a next step.

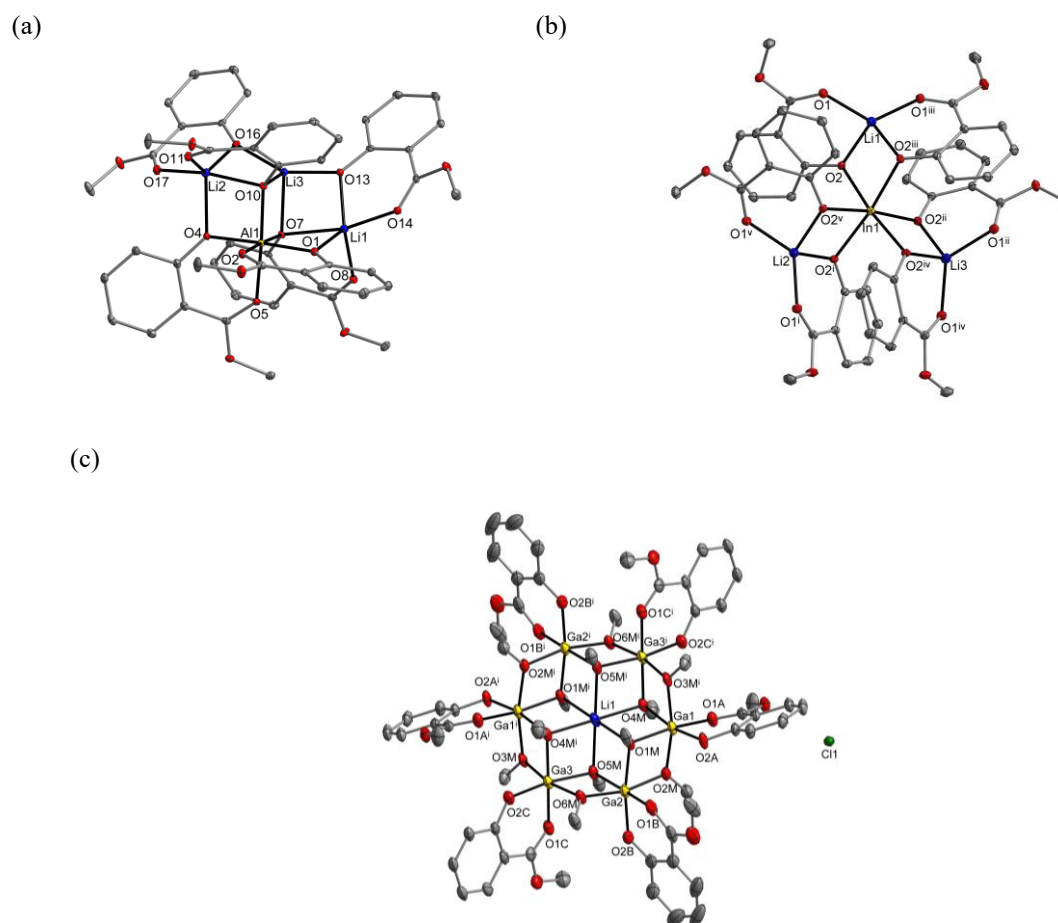


Fig. 1. The molecular structure of $[\text{AlLi}_3(\text{sal-Me})_6]$ (a), $[\text{InLi}_3(\text{sal-Me})_6]$ (b), and $[\text{Ga}_6\text{Li}(\text{sal-Me})_6(\text{OMe})_{12}]\text{Cl}$ (c).

Acknowledgments: The authors want to thank Wrocław University of Science and Technology for financial support under internal grant no. 50SD/0008/26.

Literature

- [1] S. Dagorne, R. Wehmschulte, *ChemCatChem*, **10** (2018) 2509.
- [2] S. Pahar, T. Wilde, K. Agrawal, N. T. Coles, B. M. Kariuki, D. L. Kays, A. J. Logsdail, T. Wirth, E. Richards, R. L. Melen, *Inorg. Chem.*, **65** (2026) 8289–8300.
- [3] R. Petrus, J. Utko, J. Petrus, M. Awashra, T. Lis, *Dalton Trans.*, **51** (2022) 4135–4152.

KRYSTALOGRAFIA I EPR VS NIESPAROWANY ELEKTRON

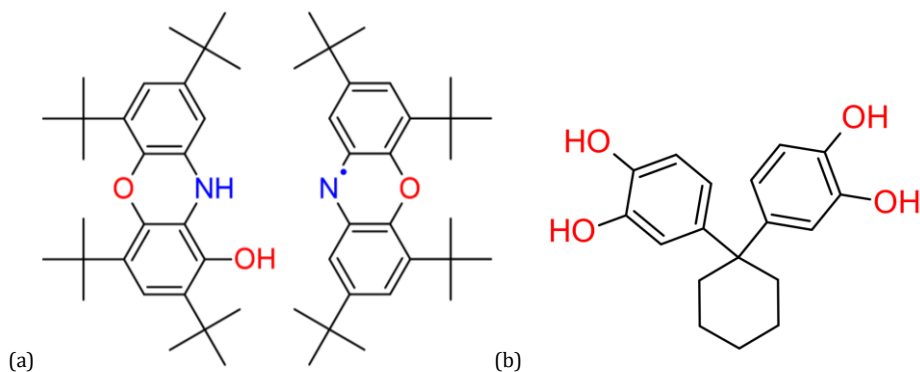
Monika Hryniuk, Maciej Witwicki

Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego, F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

Rodniki organiczne stanowią szczególną grupę indywidualnych chemicznych, zyskującą na znaczeniu w obecnej chemii nowoczesnych materiałów. Dzięki obecności niesparowanego elektronu w strukturze wykazują szereg właściwości, dzięki którym mogą być wykorzystywane m. in. w technologii OLED [1], elastycznej elektronice [2], czy też jako ligandy w magnesach molekularnych [3].

Ta wyjątkowa budowa, która pozwala uzyskać właściwości takie jak fluorescencja, czy przewodnictwo elektryczne – ma swoją cenę. Przez występowanie niesparowanego elektronu rodniki organiczne nie można badać przy pomocy spektroskopii NMR, co stanowi poważny problem. Z tego powodu głównym sposobem analizy budowy rodników organicznych jest krystalografia.

Dzięki połączeniu krystalografii i spektroskopii EPR udało się przeprowadzić badania nad nowymi związkami organicznymi o charakterze rodnikowym. Głównym celem badań było otrzymanie stabilnych rodników organicznych, które mogłyby znaleźć zastosowanie funkcjonalne. W wyniku syntez otrzymano wcześniej nieopisany układ rodnikowy będący połączeniem dwóch pochodnych 10H-fenoksazyny (rysunek 1a), połączonych wiązaniem wodorowym oraz pochodną biskatecholu (rysunek 1b), która w środowisku zasadowym przechodziła w rodnik semichinonowy. W wyniku badań EPR potwierdzono obecność układów paramagnetycznych a dzięki XRD potwierdzono budowę układów. Oba rodniki charakteryzowały się wysoką stabilnością, dzięki czemu można rozważać możliwości użycia ich w materiałach funkcjonalnych.



Rys. 1. Struktura (a) pochodnej fenoksazyny (1-hydroksy-2,4,6,8-tetra-tert-butylo-10H-fenoksazyna oraz 2,4,6,8-tetra-tert-butylo-10H-fenoksazyna), (b) pochodnej biskatecholu (1,1-cykloheksanodiylo)di(1,2-benzenodiol)).

Literatura

- [1] D. Yuan, W. Liu, X. Zhu, *Chem*, **7** (2021) 333.
- [2] L. Ji, J. Shi, T. Yu, W. Huang, *Adv. Mater.*, **32** (2020) 1908015.
- [3] H. -D. Li, S. -G. Wu, M. -L. Tong, *Chem. Commun.*, **59** (2023) 6159.

JAK PRZYCIĄGAĆ DO SIEBIE ATRAKCYJNE KRYSZTAŁY? KORELACJA STRUKTURY I ANIZOTROPII MAGNETYCZNEJ.

**Jacek Sawka¹, Alina Bieńko¹, Maciej Witwicki¹,
Barbara Machura², Pavel Kopel³, Cyril Rajnák⁴, Roman Boča⁵**

¹ Faculty of Chemistry, University of Wrocław, Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

² Department of Crystallography, Institute of Chemistry, University of Silesia,
9th Szkolna St., 40-006 Katowice

³ Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacky University
in Olomouc, Krizkovskeho 511/8, 779 00 Olomouc 9, Czech Republic

⁴ Faculty of Natural Sciences, University of SS Cyril and Methodius 91701 Trnava

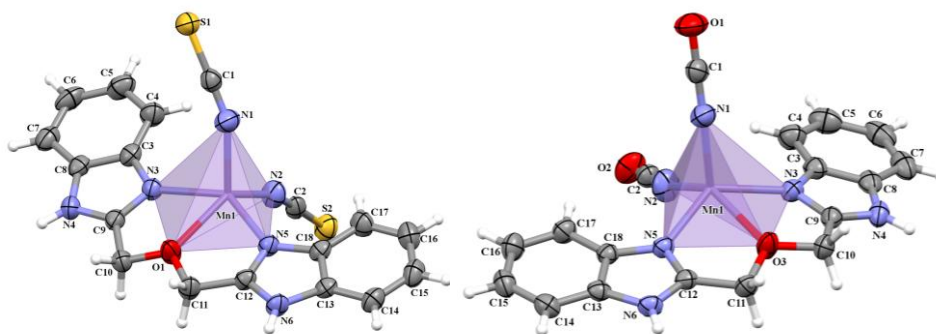
⁵ Faculty of Health Sciences, University of SS Cyril and Methodius 91701 Trnava

Anizotropia magnetyczna stanowi jeden z kluczowych parametrów determinujących występowanie zjawiska powolnej relaksacji magnetycznej w materiałach typu Single-Molecule Magnets (SMM) oraz Single-Ion Magnets (SIM). W klasycznym ujęciu warunkiem koniecznym do obserwacji tego zjawiska jest współwystępowanie wysokiego stanu spinowego oraz znacznej anizotropii magnetycznej, prowadzących do powstania bariery energetycznej utrudniającej odwrócenie kierunku namagnesowania. Wysokie wartości parametru rozszczepienia w zerowym polu magnetycznym (D) sprzyjają stabilizacji stanów magnetycznych i wydłużeniu czasu relaksacji magnetyzacji, co przez wiele lat uznawano za podstawowy warunek projektowania efektywnych materiałów typu SMM i SIM.

W ostatnich latach pogląd ten uległ jednak częściowej rewizji. Coraz to liczne badania wskazują, że obecność dużej bariery energetycznej odwracalności spinu nie jest warunkiem bezwzględnie koniecznym do wystąpienia anizotropowej powolnej relaksacji magnetycznej. W niektórych układach relaksacja spinowa może być kontrolowana przez bardziej subtelne czynniki, takie jak lokalna symetria centrum metalicznego, deformacje geometryczne, oddziaływania spin–fonon czy specyficzna topologia ligandów. Duże znaczenie mają tutaj układy o obniżonej liczbie koordynacyjnej, w których nawet niewielkie zaburzenia pola ligandów może prowadzić do powstania mierzalnej anizotropii magnetycznej oraz nietypowych mechanizmów relaksacji.

Szczególnie interesującą grupę stanowią wysokospinowe kompleksy Mn(II) ($3d^5$, $S = 5/2$), które ze względu na niemal izotropowy charakter magnetyczny i bardzo małe rozszczepienie w zerowym polu magnetycznym należą do najtrudniejszych układów wykazujących powolną relaksację magnetyczną. Przykładem takich związków są otrzymane przez nas dwa monojądrowe, pięciokoordynacyjne kompleksy Mn(II) z ligandem 2,2'-[oksybis(metyleno)]bis(1H-1,3-benzimidazolowym) (OMeBB) oraz pseudohalogenkowymi ligandami łącznikowymi NCS^- i NCO^- [Rys. 1]. Związki te charakteryzują się rzadko spotykanym środowiskiem koordynacyjnym $\{\text{MnN}_4\text{O}\}$ oraz geometrią zniekształconej piramidy kwadratowej, w którym szczególną rolę odgrywa słabe, semikoordynacyjne wiązanie pomiędzy jonem Mn^{II} a eterowym atomem tlenu liganda. Takie rozwiązanie prowadzi do obniżenia lokalnej symetrii centrum metalicznego i generowania niewielkiej, lecz mierzalnej anizotropii magnetycznej.

M-12



Rys. 1. Struktury [a] i [b] wraz z przyporządkowaną numeracją atomów. Elipsoidy termiczne atomów innych niż wodór podano przy prawdopodobieństwie wynoszącym 50%.

Badania magnetyczne, spektroskopia EPR oraz obliczenia *ab initio* potwierdziły obecność jedynie małych wartości parametru D , charakterystycznych dla układów quasi-izotropowych. Mimo to oba kompleksy wykazują indukowaną polem powolną relaksację magnetyczną w szerokim zakresie temperatur, obejmującym wartości dochodzące do około 30 K. Analiza dynamiki spinowej wskazuje, że proces relaksacji przebiega głównie poprzez mechanizmy bezpośrednie oraz fononowo wspomagane, bez udziału klasycznego procesu Orbacha. Obecność wielu kanałów relaksacji podkreśla złożony charakter oddziaływań pomiędzy strukturą molekularną, anizotropią magnetyczną oraz sprzężeniem spin–fonon.

Uzyskane wyniki pokazują, że niska liczba koordynacyjna, silnie zniekształcone środowisko koordynacyjne oraz obecność nietypowego chromoforu $\{\text{MnIIN}_4\text{O}\}$ mogą skutecznie indukować powolną relaksację magnetyczną nawet w układach o bardzo małej anizotropii. Otrzymane kompleksy stanowią tym samym przykład nowej strategii projektowania quasi-izotropowych materiałów molekularnych, w których kluczową rolę odgrywa nie wielkość anizotropii magnetycznej, lecz odpowiednio dobrana topologia liganda i kontrolowana deformacja geometrii centrum metalicznego. Co istotne, są to pierwsze opisane przykłady powolnej relaksacji magnetycznej dla kompleksów Mn(II) zawierających tak rzadkie środowisko koordynacyjne $\{\text{MnIIN}_4\text{O}\}$.

MAGNESIUM-RARE EARTH ALKOXIDES FOR IMMOBILIZATION OF NUCLEAR WASTE

Adrian Kowaliński, Rafał Petrus, Piotr Sobota

*Faculty of Chemistry, Wrocław University of Science and Technology,
Smoluchowskiego 23, 50-370 Wrocław*

The nuclear industry generates 12 000 tons of spent fuel annually, requiring the secure immobilization of highly mobile, long-lived radionuclides. To safely and effectively dispose of radioactive waste, it is necessary to design appropriate matrices with high durability, stability, and resistance to various physical and chemical conditions, such as temperature, radiation, pressure, and acidity/alkalinity. While commercial high-level waste management currently utilizes complex aluminoborosilicate glasses [1,2], utilizing magnesium-borate matrices can balance structural stability, providing a highly durable material designed specifically to permanently entrap hazardous isotopes within its atomic structure. To safely evaluate these matrices without radiological hazards, non-radioactive Nd^{III} and Eu^{III} are utilized as chemical surrogates to model the Cm^{III} and Am^{III} , respectively, due to their nearly identical ionic radii and valence states [3].

In our work, we developed two synthetic routes for synthesis of magnesium-rare earth alkoxides of formula $[\text{Ln}_4\text{Mg}_2(\mu_6\text{-O})(\mu_3\text{-OR})_8(\text{X})_x\text{Cl}_6]$, where $\text{Ln} = \text{Nd}$ ($\text{X} = \text{HOR}$; $x = 2$), Sm ($x = 0$) or Eu ($\text{X} = \text{H}_2\text{O}$; $x = 0.25$) in 2-methoxyethanol, as pictured in Figure 1. One method focused on reacting rare-earth chlorides with magnesium alkoxide with the partial transfer of Cl^- ions to Mg^{II} centers. The other involved the direct reaction of metallic RE^{III} with anhydrous magnesium chloride and 2-methoxyethanol driving the formation of the heterometallic alkoxide framework.

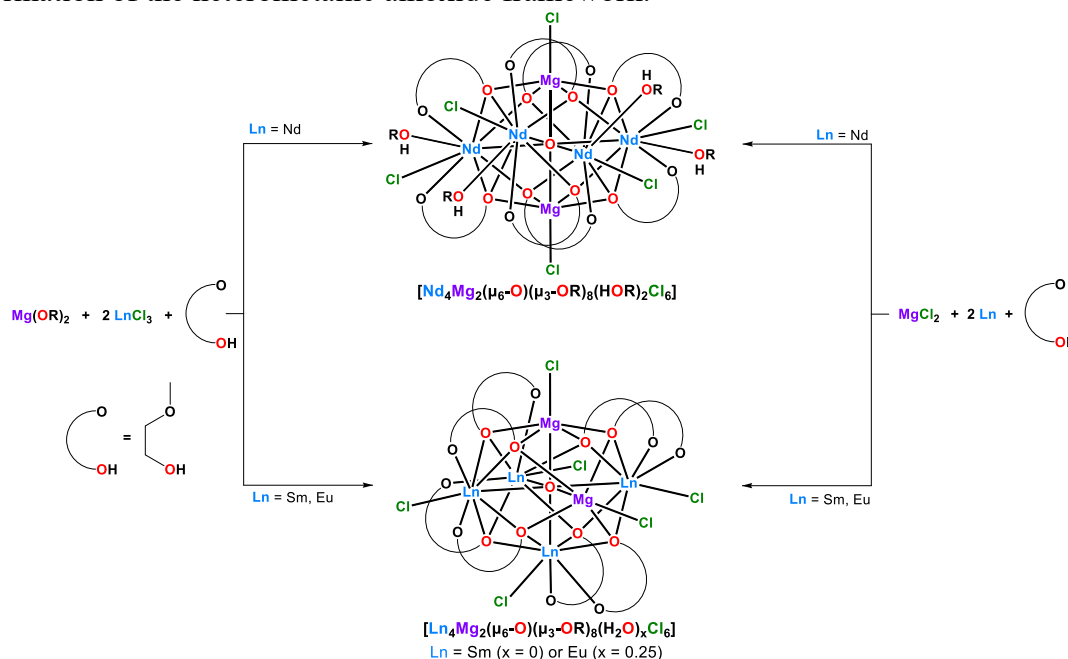


Fig. 1. Synthesis of $[\text{Nd}_4\text{Mg}_2(\mu_6\text{-O})(\mu_3\text{-OR})_8(\text{HOR})_2\text{Cl}_6]$, $[\text{Sm}_4\text{Mg}_2(\mu_6\text{-O})(\mu_3\text{-OR})_8\text{Cl}_6]$, and $[\text{Eu}_4\text{Mg}_2(\mu_6\text{-O})(\mu_3\text{-OR})_8(\text{H}_2\text{O})_{0.25}\text{Cl}_6]$ complexes.

M-13

The core of those complexes features a central, hexacoordinated oxo ligand ($\mu_6\text{-O}$) directly bonded to six metal centers and is stabilized by eight 2-methoxyethoxide groups ($\mu_3\text{-OR}$). These metal ions arrange themselves into an octahedron encapsulating the central oxygen atom (Figure 2). The specific arrangement within this bipyramidal cage depends heavily on the rare-earth radius. For neodymium, the core is perfectly ordered, the four Nd^{III} ions occupy the equatorial plane, while the two Mg^{II} ions strictly occupy the tips of the bipyramid. In contrast, for samarium and europium, the structure exhibits partial metal disorder, where one of the RE^{III} ions exchange sites with a magnesium center between the equatorial and apical positions.

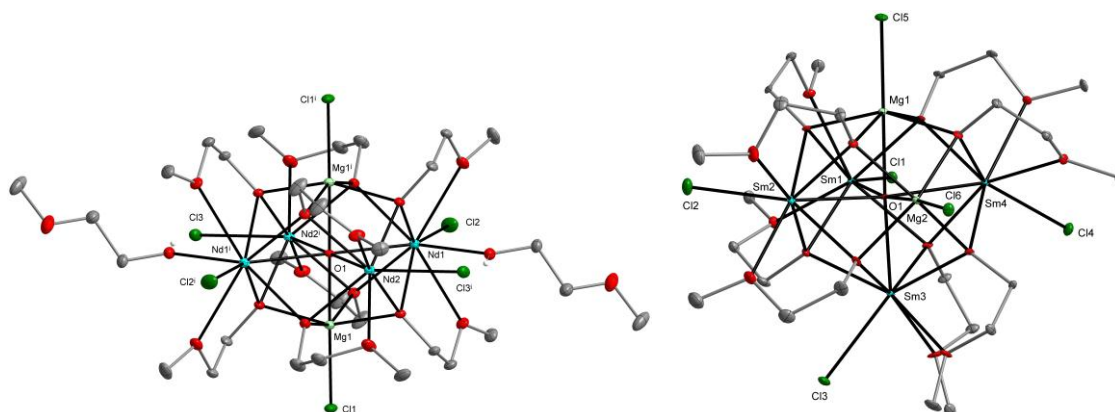


Fig. 2. Molecular structures of $[\text{Nd}_4\text{Mg}_2(\mu_6\text{-O})(\mu_3\text{-OR})_8(\text{HOR})_2\text{Cl}_6]$, and $[\text{Sm}_4\text{Mg}_2(\mu_6\text{-O})(\mu_3\text{-OR})_8\text{Cl}_6]$ complexes.

These heterometallic clusters were utilized as single-source precursors, alongside $[\text{Mg}_4(\mu_3\text{-OR})_4(\text{HOEt})_4\text{Cl}_4]$ and boric acid for the synthesis of oxide nanomaterials. The RE^{III} ions served as surrogate models for minor actinides to evaluate high-level nuclear waste immobilization pathways, as presented in Figure 3. The reactive mixtures were prepared with $\text{Mg}:\text{B}:\text{RE}$ molar ratios of either 1:2:0.3 or 1:2:0.5, aiming to tailor the final borate matrix composition for optimized structural entrapment of the target radionuclides.

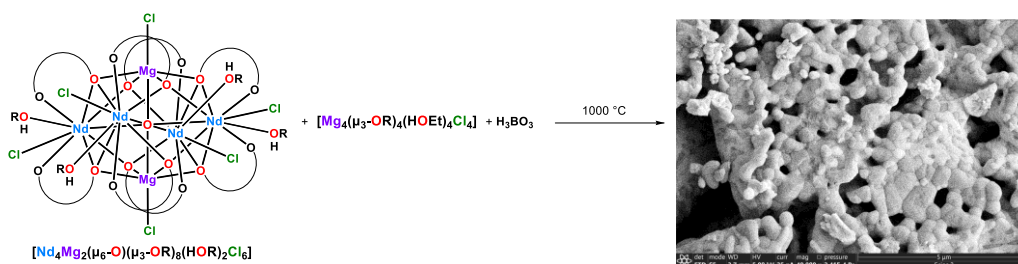


Fig. 3. Synthesis of oxide nanomaterials using $[\text{Nd}_4\text{Mg}_2(\mu_6\text{-O})(\mu_3\text{-OR})_8(\text{HOR})_2\text{Cl}_6]$, $[\text{Mg}_7(\mu_3\text{-OR})_6(\mu_3\text{-OR})_6]^{2+}$ and H_3BO_3 .

Authors thank the National Science Centre Poland (OPUS 2023/49/B/ST4/04068) for financial support.

Literature

- [1] S. Kim, T. Yeo, S. Hyun, J. Lee, J. Cho, *J. Non-Cryst. Solids*, **651** (2025), 123387.
- [2] B. K. Singh, M. A. Hafeez, H. Kim, S. Hong, J. Kang, W. Um, *ACS EST Engg.*, **1** (2021), 1149.
- [3] R. Petrus, A. Kowaliński, T. Lis, M. Siczek, P. Sobota, *Inorg. Chem.*, **64** (2025), 16020.

FROM STRUCTURE TO FUNCTIONAL OPTICAL PROPERTIES – DESIGNING HYBRID MATERIALS THROUGH CRYSTALLOGRAPHIC CONTROL

Magdalena N. Rowińska, Tamara J. Bednarchuk, Anna Gaęor

*Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences,
Okólna 2, 50-422 Wrocław, Poland*

The deliberate design of organic–inorganic hybrid halides with tailored optical and electronic properties is one of the most dynamic frontiers in crystal engineering. That compounds family offers great chemical flexibility because the organic and inorganic structural components can be selected to provide intentional, unique, and synergistic functionalities. That makes them compelling candidates for photovoltaics [1], luminescence [2], and broader optoelectronic applications [3]. However, realizing this potential demands a precise crystallographic understanding of how molecular architecture, framework dimensionality, metal coordination geometry, cation dynamics, and intermolecular interactions collectively dictate macroscopic properties.

This presentation showcases three lead-free hybrid halide systems illustrating how single-crystal X-ray diffraction and multi-technique analysis provide the essential foundation for the crystal engineering of functional materials.

In (Pyrrolidinium)₃[M₂I₉] (M = Bi, Sb), a family of ferroelastic semiconductors with narrow band gaps of ~2.1–2.2 eV, synchrotron powder diffraction, ¹H NMR spin-lattice relaxation, and dielectric spectroscopy collectively revealed how the dynamics of disordered organic cations drive a cascade of symmetry-breaking phase transitions, directly shaping the electronic and dielectric response of the material [4].

In (MHy)₂SbI₅, the same crystallographic toolkit was applied to two concomitant polymorphs. It was demonstrated that the spatial arrangement of 1D [SbI₅]²⁻ chains and the packing of methylhydrazinium cations govern both the contrasting thermal stability of the two phases and non-linear optical properties but have no influence on broad red photoluminescence (λ~713 nm) originating from the stereoactive 5s² lone pair of Sb(III) [5].

In a double perovskite-derived ferroelastic (Piperidinium)₂[KBiBr₆], with near room temperature phase transition, structural analysis provided evidence of Br⋯Br interactions on phase stability, while electronic confinement along one-dimensional inorganic pillars was found to be responsible for both excitonic and Bi(III)-centered luminescence [6].

Taken together, these three studies demonstrate that crystallography is not merely a characterization tool, but the central engine of crystal engineering: the ability to read, compare, and interpret crystal structures across temperatures and polymorphic forms is what makes the rational design of next-generation, functional materials possible.

Literature

- [1] J. J. Yoo et al., *Nature*, **590** (2021) 587–593.
- [2] K. M. McCall et al., *ACS Materials Lett.*, **2**(9) (2020) 1218–1232.
- [3] W. Wang et al., *ACS Materials Lett.*, **6**(1) (2024) 203–211.
- [4] M. Rowińska et al., *Molecules*, **28**(9) (2023) 3894.
- [5] M. Rowińska et al., *Molecules*, **29**(2) (2024) 455.
- [6] M. Rowińska et al., *Chem. Mater.*, **37**(18) (2025) 7125–7135.

REFERATY PLENARNE
ORAL SESSIONS

R-1

NEW PARADIGM FOR NUCLEIC ACID STRUCTURE VALIDATION

Mariusz Jaskólski*

*Department of Crystallography, Faculty of Chemistry, A. Mickiewicz University &
Institute of Bioorganic Chemistry, Polish Academy of Sciences, Poznań*

**e-mail: mariuszj@amu.edu.pl*

The standards for nucleic acid valence geometry that are still used as validation targets by the PDB, and as restraints in many refinement protocols, were derived ~30 years ago from CSD analysis. However, a revised library of such parameters, with elements of conformational dependence, has been recently created from the tenfold larger CSD. At the same time, the PDB has grown nearly 50 times. This expansion of structural knowledgebase has motivated a Working Group (WG) of international experts to revisit the nucleic acid validation protocols used by the PDB. First, the CSD-derived targets were re-examined, with focus on their conformational dependence. Next, they were compared with the geometry distributions found in a quality-filtered reference subset of nucleic acid crystal structures held in the PDB. The PDB-derived valence bond and angle mean values turned out to be close to the CSD targets, but many parameters had highly non-Gaussian or even multimodal distributions. Based on these observations, the WG has worked out a novel approach to nucleic acid validation by proposing that:

- (1) There will be only three intervals, labeled Preferred, Allowed, and Of Concern.
- (2) The intervals for each parameter are now largely defined by probability scores and decile positions on the PDB-derived distributions rather than by sharp validation targets.
- (3) Additionally, the Preferred interval is extended if the $\mu_{\text{CSD}} \pm 3\sigma_{\text{CSD}}$ boundaries are more permissive.
- (4) The Allowed/Of Concern boundary is tuned to highlight cases that are infrequent in the PDB; they may represent true model errors or genuine features of interest, and in both situations should be examined individually.
- (5) Cases identified as Of Concern should be supported in the validation report by comprehensive statistical data.

R-2

INVESTIGATION OF CuX – HX – POLYAMINE SYSTEMS (X=Cl, Br) USING TWO-DIMENSIONAL COMPOSITION DIAGRAMS

Andrii Hultiaiev, Žan Zakošek, Evgeny Goreshnik

Jožef Stefan Institute, Jamova 39, 1000 Ljubljana Slovenia

Using two-dimensional composition diagrams of the CuCl–HCl–polyamine systems 27 novel chloro(I)cuprates containing DABCO (1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane), N-alkyl derivatives of DABCO, 3,5-diamino-1,2,4-triazole and its alkyl derivatives, hexamethylenediamine, and 1,3,5-trimethyl-1,3,5-triazinane were synthesized and structurally characterized. The obtained compounds exhibit a variety of copper-chloride fragments: polynuclear Cu_2Cl_6 , Cu_3Cl_7 , Cu_4Cl_6 , Cu_4Cl_7 , Cu_4Cl_8 , Cu_5Cl_6 fragments, infinite CuCl and Cu_2Cl_4 chains, $(\text{Cu}_7\text{Cl}_6)_n$ and $(\text{Cu}_9\text{Cl}_{13})_n$ 3D-frameworks. DABCO-, N-Et-DABCO-, and N-Me-DABCO-containing chlorocuprates were tested as catalysts in the mild oxidation of alkanes (cyclohexane, methylcyclohexane) by peroxides and in phenoxazinone synthase activity. The trinuclear $[\text{N},\text{N}'\text{-Et}_2\text{DABCO}]_2[\text{Cu}_3\text{Cl}_7][\text{H}_2\text{O}]$ and quadrinuclear $[\text{N-MeDABCO}]_2[\text{Cu}_4\text{Cl}_6][\text{MeOH}]$ complexes demonstrate a sharp initial catalytic activity that then plateaus, yielding high amounts of alcohols and ketones in the mild oxidation of alkanes. In contrast, the $[\text{N},\text{N}'\text{-Me}_2\text{DABCO}]_2[\text{Cu}_9\text{Cl}_{13}]$ salt shows a consistently high reaction rate in phenoxazinone synthase activity throughout the process.

By varying the molar ratios of the starting materials and using both solvothermal synthesis (in acetonitrile) and electrochemical synthesis (in acetonitrile and ethanol), six new compounds were successfully prepared within the ternary CuBr–HBr–DABCO system. Various bridging roles for neutral, mono-, and doubly protonated DABCO moieties were observed. Among the compounds obtained, one is a rare example of a three-dimensional copper(I) bromide framework containing a $[\text{Cu}_{11.13}\text{Br}_{16}]^{4.87-}$ anionic cluster. Such three-dimensional copper(I) bromide frameworks are relatively uncommon, with only a limited number of related structures currently reported in the Cambridge Structural Database (CSD).

In addition to structural characterization, the luminescent properties of three selected compounds were investigated to gain further insight into the structure–property relationships within the family of non-aromatic organic copper(I) halides. For two zero-dimensional organic copper(I) halides, two distinct emission bands were observed when the excitation wavelength was changed. The broad emission bands, together with microsecond excited-state lifetimes, suggest that the emission most likely originates from self-trapped excited states, which are commonly associated with distorted excited-state geometries in copper(I) halide systems. Furthermore, the two emission bands exhibit different excited-state lifetimes and different full widths at half maximum (FWHM), as well as large Stokes shifts, indicating that two radiative relaxation pathways are involved.

PRESSURE EVOLUTION OF ELECTRONIC AND CRYSTAL STRUCTURE IN GROUP 15 ELEMENTS

Kamil F. Dziubek¹, Matteo Ceppatelli^{2,3}, Marta Morana⁴, Demetrio Scelta^{2,3}, Manuel Serrano-Ruiz², Adhara Baldassarre³, Enrico Berretti², Andrew B. Cairns⁵, Konstantin Glazyrin⁶, Roberto Bini^{3,7,8}, Maurizio Peruzzini²

¹ *Institut für Mineralogie und Kristallographie, Universität Wien, Josef-Holaubek-Platz 2, 1090 Wien, Austria*

² *ICCOM-CNR, Istituto di Chimica dei Composti OrganoMetallici, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Via Madonna del Piano 10, 50019 Sesto Fiorentino (FI), Italy*

³ *LENS, European Laboratory for Non-linear Spectroscopy, Via Nello Carrara 1, 50019 Sesto Fiorentino (FI), Italy*

⁴ *Dipartimento di Scienze della Terra, Università di Firenze, Via La Pira 4, 50121 Firenze, Italy*

⁵ *ESRF, European Synchrotron Radiation Facility, 71 Avenue des Martyrs, CS 40220, 38043 Grenoble, Cedex 9, France*

⁶ *DESY, Deutsches Elektronen-Synchrotron, Notkestraße 85, 22607 Hamburg, Germany*

⁷ *Dipartimento di Chimica "Ugo Schiff", Università di Firenze, Via della Lastruccia 3, 50019 Sesto Fiorentino (FI), Italy*

⁸ *INO-CNR, Istituto Nazionale di Ottica, Via Nello Carrara 1, 50019 Sesto Fiorentino (FI), Italy*

Elements under elevated pressure tend to increase their coordination number, displaying properties like that of the elements located below them in the periodic table [1,2]. This phenomenon was noted already in the structural chemistry book by Alexander Frank Wells [3], who stated that the crystal structures of gray arsenic (A7, space group $R\bar{3}m$ and black phosphorus (bP; A17, $Cmce$) can be regarded as distorted forms of the simple cubic (sc , $Pm\bar{3}m$) structure. The ideal simple cubic structure is rare in nature due to its low packing efficiency and coordination number.

On the pressure increase black phosphorus first transforms into the A7 phase and then, passing through a pseudo-simple cubic structure (p- sc), eventually reaches the sc phase [4,5]. A similar pressure-induced phase transition from the A7 phase to the sc phase has also been observed in elemental arsenic [6]. Recent reports indicate that the polymeric cg -N (space group $I2_13$) and bp -N (bP-type structure, space group $Cmce$) phases of nitrogen can also be viewed as distorted simple cubic atomic arrangements [7].

Literature

- [1] C. T. Prewitt, R. T. Downs, *Rev. Mineral.*, **37** (1998) 283.
- [2] W. Grochala, R. Hoffmann, J. Feng, N. W. Ashcroft, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **46** (2007) 3620.
- [3] A. F. Wells, *Structural Inorganic Chemistry*, London, Oxford University Press (1975).
- [4] D. Scelta, A. Baldassarre, M. Serrano-Ruiz, K. F. Dziubek, A. B. Cairns, M. Peruzzini, R. Bini, M. Ceppatelli, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56** (2017) 14135.
- [5] D. Scelta, A. Baldassarre, M. Serrano-Ruiz, K. F. Dziubek, A. B. Cairns, M. Peruzzini, R. Bini, M. Ceppatelli, *Chem. Commun.*, **54** (2018) 10554.
- [6] M. Ceppatelli, M. Morana, E. Berretti, K. F. Dziubek, K. Glazyrin, D. Scelta, R. Bini, M. Peruzzini (2026) in preparation.
- [7] D. Laniel, B. Winkler, T. Fedotenko, A. Pakhomova, S. Chariton, V. Milman, V. Prakapenka, L. Dubrovinsky, N. Dubrovinskaia, *Phys. Rev. Lett.*, **124** (2020) 216001.

HIGH-PRESSURE POLYMORPHS STABILIZED AT AMBIENT CONDITIONS

Andrzej Katrusiak

*Department of Materials Chemistry, Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz
University, 61-614 Poznań*

Resorcinol, first described by Heinrich Hlasiwetz and Ludwig Barth in 1864 [1], was the first organic compound for which the structures of polymorphs were determined by X-ray diffraction [2,3]. Owing to numerous applications, resorcinol is intensively investigated. Apart from the original polymorphs α (space group $Pna2_1$) and β (the same space-group type $Pna2_1$), also high-pressure polymorphs γ and δ were postulated, but their structures were not determined [4]. Later, a new polymorph ε (space group $P2_12_12_1$) was obtained in atmospheric pressure and its structure was reported [5]. Our studies revealed a new high-pressure polymorph ζ , of space group $P2_1/c$ [6]. We also obtained polymorph ε under pressure, but we could not recover it from the diamond-anvil cell, as it transformed either to the α or β forms below 0.2 GPa. This triggered our search for the methods of stabilizing the high-pressure polymorphs in the atmospheric conditions. The method of rational doping has been described and also applied for stabilizing other organic compounds.

Literature

- [1] H. Hlasiwetz, L. Barth, Ueber einen neuen, dem Orcin homologen Körper. *Justus Liebigs Annalen der Chemie und Pharmacie*, **130** (1864) 354–359.
- [2] J. M. Robertson, The Structure of Resorcinol a Quantitative X-ray Investigation. *Proc. R. Soc. London A*, **157** (1936) 79–99.
- [3] J. M. Robertson, A. R. Ubbelohde, A new form of resorcinol. II. Thermodynamic properties in relation to structure. *Proc. R. Soc. London A*, **167** (1938) 136–147.
- [4] S. E. Kichanov et al., The polymorphic phase transformations in resorcinol at high pressure. *J. Mol. Struct.*, **1006** (2011) 337–343
- [5] Q. Zhu et al., Resorcinol Crystallization from the Melt: A New Ambient Phase and New Riddles. *J. Am. Chem. Soc.*, **138** (2016) 4881–4889.
- [6] F. Safari, A. Katrusiak, High-pressure polymorphs nucleated and stabilized by rational doping under ambient conditions, *J. Phys. Chem. C*, **125** (2021) 23501–23509.

HIGH-PRESSURE STRUCTURAL TRANSFORMATIONS AND OPTOELECTRONIC RESPONSE OF PERYLENE DIIMIDE SEMICONDUCTORS

Szymon Sobczak¹, Paulina Ratajczyk¹, Lucia Maini², Andrzej Katrusiak¹

¹ *Adam Mickiewicz University, Poznań*

² *University of Bologna*

Perylene diimides (PDIs) are among the most promising *n*-type organic semiconductors due to their high electron mobility, strong visible absorption, and exceptional thermal and photochemical stability. Despite extensive studies at ambient conditions, their structural adaptability and optoelectronic response under high pressure remain insufficiently explored. This work presents a comprehensive investigation of pressure-induced structural transformations and structure-property relationships in a series of imide-substituted PDI derivatives, including PTCDI-Ph and PDI-C_n (*n* = 5-8), using high-pressure single-crystal X-ray diffraction in diamond-anvil cells combined with UV-Vis-NIR absorption and photoluminescence spectroscopy.

Compression up to ~5 GPa induces significant reductions in π - π stacking distances and conformational rearrangements of substituents, enabling more efficient molecular packing. In PTCDI-Ph [1], pressure decreases the π - π stacking distance from 3.523(7) Å at ambient conditions to 3.183(3) Å at 2.85 GPa, accompanied by torsional adjustments of phenyl substituents and the emergence of pressure-induced phase III above ~3 GPa. These structural changes correlate with pronounced bathochromic shifts in absorption and photoluminescence spectra, reflecting band-gap narrowing driven by enhanced intermolecular orbital overlap. Alkyl-substituted PDI derivatives (PDI-C_n) exhibit even greater structural flexibility. In PDI-C6 [2], compression triggers sequential phase transitions associated with conformational changes of the *n*-hexyl chains, including the emergence of synclinal conformers that improve packing efficiency and reduce π -stacking distances by more than 9% across the studied pressure range. Across the PDI-C_n series, pressure-induced polymorphism follows a chain-length-dependent trend, with longer alkyl substituents facilitating earlier phase transitions and greater accommodation of compression strain. All investigated PDIs display pressure-induced bathochromic shifts in absorption and emission, with the magnitude strongly dependent on substituent length and packing motif. Notably, PDI-C8 exhibits the largest absorption-edge shift, whereas PDI-C6 shows the smallest photoluminescence shift [3], demonstrating that subtle variations in molecular packing govern optoelectronic response. These results confirm that pressure acts as a clean thermodynamic variable enabling systematic tuning of intermolecular interactions and electronic structure in organic semiconductors.

The findings highlight high pressure as a powerful tool for controlling polymorphism, molecular packing, and optoelectronic properties in PDI semiconductors. Understanding these mechanisms provides a pathway for rational design of stimuli-responsive organic electronic materials, including pressure sensors, flexible optoelectronics, and tunable photovoltaic components.

R-5

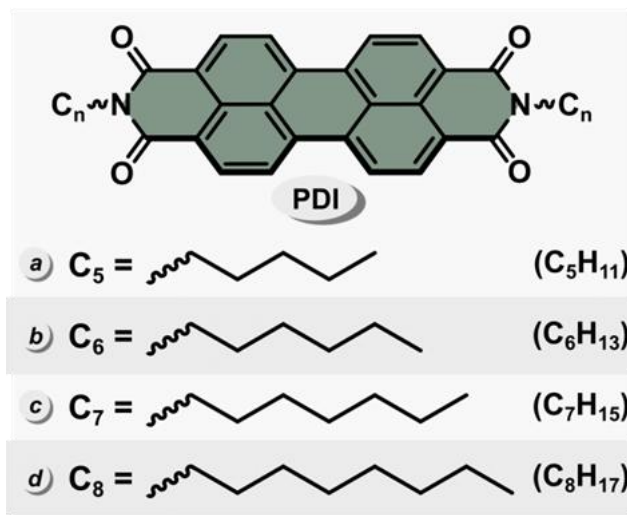


Fig. 1. The scheme of investigated PDIs.

Literature

- [1] P. Ratajczyk, S. Sobczak, P. Woźny, A. Wcisło, T. Poręba, A. Katrusiak, *J. Mater. Chem. C*, **11** (2023) 11055–11065.
- [2] P. Ratajczyk, S. Sobczak, M. Andrzejewski, F. Marin, M. Marchini, L. Maini, A. Katrusiak, *J. Mater. Chem. C*, **13** (2025) 13509–13518.
- [3] P. Ratajczyk, S. Sobczak, M. Andrzejewski, P. Woźny, F. Marin, L. Maini, A. Katrusiak, *J. Mater. Chem. C*, **14** (2026) 7890–7904.

HIGH-PRESSURE CRYSTALLOGRAPHIC STUDIES OF SPIN CROSSOVER COMPOUNDS: UNRAVELING COUPLED STRUCTURAL AND SPIN-STATE TRANSITIONS

Damian Paliwoda^{1,2}, Livia Getzner¹, Yasmine Remili¹, Laure Vendier¹, Samuel Gallego-Parra^{3,4}, Saioa Cobo¹, Gábor Molnár¹, Azzedine Bousseksou¹

¹ LCC, CNRS & Université de Toulouse (UPS, INP), 31077 Toulouse, France

² European Spallation Source ERIC, 224 84 Lund, Sweden

³ Instituto de Diseño para la Fabricación y Producción Automatizada, MALTA Consolider Team, Universitat Politècnica de València, 46022 València, Spain

⁴ European Synchrotron Radiation Facility, 38000 Grenoble, France

Spin crossover (SCO) complexes exhibit reversible transitions between low-spin (LS) and high-spin (HS) states, typically triggered by temperature, pressure, or light. The substantial volume change accompanying the HS→LS transition often couples SCO with structural phase transitions, giving rise to multifunctional materials with complex phase diagrams. Despite this, the mechanisms governing such coupled transitions remain insufficiently understood, and systematic high-pressure studies are still relatively scarce.

Comprehensive high-pressure single-crystal X-ray diffraction (HP-SC-XRD) investigations have been carried out across multiple classes of SCO materials. Molecular SCO complexes [Fe^{II}(H₂B(pz)₂)₂(bipy)] and [Fe^{II}(H₂B(pz)₂)₂(phen)] (pz = pyrazol-1-yl, bipy = 2,2'-bipyridine, phen = 1,10-phenanthroline) were examined up to 2 GPa and in the temperature range from 100 to 300 K. The bipyridine complex exhibits a continuous, isostructural SCO, whereas the phenanthroline derivative undergoes a symmetry-breaking transition ($C2/c \rightarrow P\bar{1}$) concomitant with spin crossover. Notably, external pressure modulates the coupling between structural and spin transitions, shifting from nearly simultaneous HS_{C2/c} → LS_{P-1} to a sequential HS_{C2/c}→LS_{C2/c}→LS_{P-1} pathway. Structural analysis based on spontaneous strain and order-parameter correlations shows that even nominally separated transitions remain strongly connected via elastic strain coupling, whereas simultaneous transitions are partially split.

Additional examples include Hofmann-type coordination polymer clathrates with 2D planar networks, i.e. {Fe(R-pbpy⁺)₂[μ²-M(CN)₄]₂·2H₂O} (pbpy = phenylbipyridinium, R = CH₃, M = Pd), in which the Fe^{II} spin transition is coupled to pressure-induced electron transfer involving redox-active ligands.

These metal-organic frameworks display pronounced pressure-induced behavior, including an unusual and fully reversible sequence of spin-state transitions (HS→LS→HS→LS). The same reversible spin-state sequence is also observed in related Pt-based compounds with different guest molecules, indicating a general character.

The above results provide fundamental insight into elastic coupling mechanisms and establish pressure as an effective tool for tuning SCO behavior across both molecular complexes and Hofmann clathrates, with implications for the design of multifunctional materials with controllable spin states.

R-6

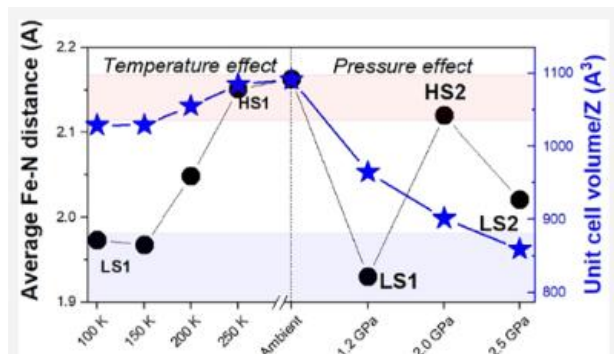


Fig. 1. Average metal–ligand distance (circles) and unit cell volume (stars) for compound $\{\text{Fe}(\text{CH}_3\text{-pbpy}^+)_2[\mu^2\text{-Pd}(\text{CN})_4]_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}\}$ measured at different temperature and pressure values. Lines are guides for the eye.

Acknowledgements: This work was supported by the European Research Council (ERC) under the European Union’s Horizon 2020 Research and Innovation Programme (grant agreement No. 101019522, A.B.), the University of Toulouse III (CPJ 288890, S.C.), and the Agence Nationale de la Recherche (Project ANR-23-CPJ1-0112-01, S.C.). We acknowledge the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) for provision of synchrotron radiation facilities and beam time allocation (ID15b beamline, proposal No. CH-6295).

Literature

- [1] D. Paliwoda, L. Vendier, W. Nicolazzi, G. Molnár, A. Bousseksou, *Inorg. Chem.*, **61** (2022) 15991.
- [2] L. Getzner, Y. Remili, D. Paliwoda, S. Gallego-Parra, J. Elias Figueiredo Soares Rodrigues, C. J. Sahle, R. Kamiński, Y. Li, L. Vendier, G. Molnár, S. Cobo, A. Bousseksou, *J. Am. Chem. Soc.* **147** (2025) 46497.

WHEN TEMPERATURE ACTIVATES AND PRESSURE FAILS TO ORDER: FRESH PERSPECTIVE ON CAGE-CATION DISORDER IN HYBRID COMPOUNDS

Andrzej Nowok¹, Anna Gaęor², Szymon Sobczak³, Adam Sieradzki¹

¹ *Department of Experimental Physics, Wrocław University of Science and Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław*

² *Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław*

³ *Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań*

Hybrid organic–inorganic perovskites are an emerging class of functional materials that combine structural flexibility with strong dielectric and optoelectronic responses. Their properties are governed not only by the inorganic framework but also by the motion of molecular cations embedded in the lattice [1]. Understanding how this molecular dynamics influences macroscopic electrical behavior is therefore essential for future electronic and sensing applications.

In this work, we utilize two representative hybrid formates (formamidinium manganese formate and acetamidinium manganese formate) to show that temperature and pressure affect the dynamics of polar organic cations in markedly different ways. Based on ambient- and high-pressure X-ray diffraction and broadband dielectric studies, we prove that cation motion requires local framework rearrangements, introducing energy and volumetric barriers, with relaxation strongly temperature-dependent due to a phonon-related mechanism of motion. In contrast, the small moment of inertia of the cage cations makes their dynamics surprisingly insensitive to pressure, despite significant lattice compressibility and softness of hybrid perovskites. Consequently, conversely to the common belief, relaxation times do not correlate with unit-cell volume or hydrogen-bond lengths, indicating that electronic properties of hybrid organic-inorganic compounds can be effectively tuned via external stimuli such as temperature or pressure, without structural changes. These findings provide a fundamental understanding of how molecular motion within the crystalline framework decouples from lattice compression, highlighting a new strategy for controlling functional responses in hybrid perovskites. This insight opens pathways for designing materials with tunable dielectric and optoelectronic properties for next-generation electronic devices [2].

Literature

- [1] X.-J. Xu, Z.-Y. Du, W.-X. Zhang, X.-M. Chen, *CrystEngComm*, **18** (2016) 7915–7928.
- [2] A. Nowok, S. Sobczak, K. Roszak, A. Z. Szeremeta, M. Mączka, A. Katrusiak, S. Pawlus, F. Formalik, A. J. B. dos Santos, W. Paraguassu, A. Sieradzki, *Nat. Commun.*, **15** (2024) 7571.

WATER UPTAKE AND BREATHING BEHAVIOUR IN HYDROXYLATED TRIANGLIMINE CRYSTALS

Agnieszka M. Janiak

*Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Uniwersytetu Poznańskiego 8,
61-614 Poznań*

Soft porous crystals combine long-range structural order with the ability to undergo reversible structural transformations. Their characteristic "breathing" behaviour is governed by the interplay between framework flexibility and host-guest interactions, with guest sorption stabilizing distinct structural states [1,2]. Hydroxylated trianglimine crystals represent an intriguing example of such adaptive materials, combining molecular shape persistence with structural responsiveness. Here, we report two distinct but related phenomena observed in these crystals: spontaneous water uptake and release, and CO₂-induced breathing.

The trianglimine crystals contain 1 nm-wide channels that readily and reversibly sorb water from the atmosphere. Hydration is accompanied by a pronounced colour change that correlates with relative humidity as well as subtle reorganisation of host structure. Combined experimental and computational studies further reveal that water confined within the nanochannels remains dynamic at temperatures down to -70 °C, enabling dehydration under conditions well below the freezing point of bulk water [3].

In addition to the open channels, the trianglimine crystals also contain isolated voids that appear inaccessible to water molecules. However, *in situ* diffraction and microscopy studies demonstrate that CO₂ uptake induces cooperative molecular motions that expand these voids, creating transient porosity and enabling further gas inclusion. This reversible process results in macroscopic crystal elongation of approximately 10% along a single crystal axis [4,5].

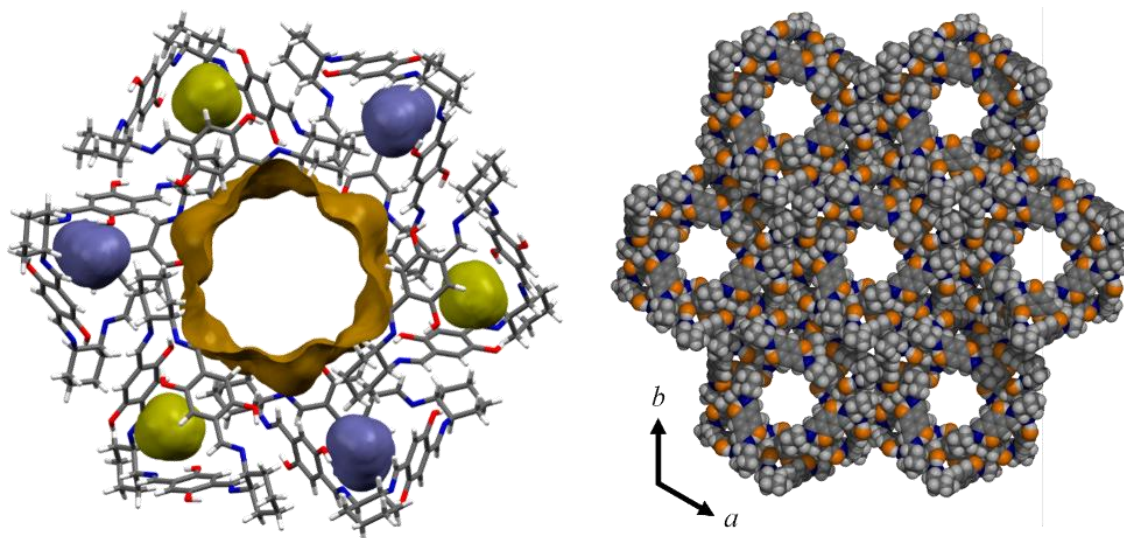


Fig. 1. Porous features of hydroxylated trianglimine crystals: the 1 nm-wide channels together with isolated voids (left), and a view of the host matrix highlighting the open channels (right).

R-8

Literature

- [1] S. Horike, S. Shimomura, S. Kitagawa, *Nature Chemistry*, **1** (2009) 695.
- [2] O. Sato, *Nature Chemistry*, **8** (2016) 644.
- [3] A. C. Eaby, D. C. Myburgh, A. Kosimov, M. Kwit, C. Esterhuysen, A. M. Janiak, L. J. Barbour, *Nature*, **616** (2023) 288.
- [4] A. I. Vicatos, L. Loots, G. Mathada, J. Drwęska, A. M. Janiak, L. J. Barbour, *Nature Materials*, **25** (2026) 481.
- [5] L. J. Barbour, A. M. Janiak, *Nature Materials*, **25** (2026) 355.

R-9

HOOPS, CAGES AND SANDWICHES: FROM A CRYSTALLOGRAPHIC PLAYGROUND TO EXPLORING NEW FUNCTIONAL MATERIALS

Wojciech Stawski

*Institute of Organic Chemistry II and New Materials, Albert-Einstein-Allee 11,
89081 Ulm, Germany*

Macrocycles and cages based on (anti)aromatic molecules are fascinating synthetic targets; apart from having aesthetic 3D structures (refinement of which is often a nightmare...), they are useful as functional materials with applications ranging from host-guest chemistry, through catalysis, to molecular electronics [1-2].

In this talk, I will showcase some molecules with exciting crystal structures and applications, that I have been working on recently. These include: (a) macrocyclic organic battery materials (Fig. 1a) [3], (b) coordination cages capable of binding fullerenes and small organic guests (Fig. 1b) [4], (c) sandwiched organometallic complexes of [18]annulene (Fig. 1c) [5], and (d) giant porphyrin nanorings [6]. Although there will be a strong emphasis on the structural aspects of these molecules and difficulties with getting usable data, the talk will be also intriguing for the part of the audience interested in broadly defined materials chemistry, and I can promise many synthetic flavours as well!

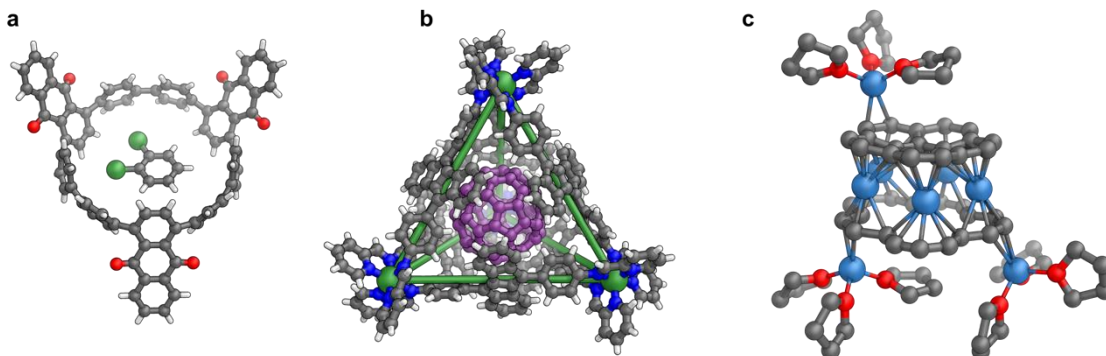


Fig. 1. Examples of discussed molecules: (a) anthraquinone-functionalised cycloparaphenylene nano hoop; (b) M_4L_6 -type coordination cage with encapsulated C_{60} fullerene; (c) [18]annulene lithium sandwich.

Literature

- [1] X. Li, S. Guo, H. Jiang, *Chem. Commun.*, **61** (2025) 9836–9852.
- [2] P. Seitz, M. Bhosale, L. Rzesny, A/ Uhlmann, J. S. Wössner, R. Wessling, B. Esser, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **62** (2023) e202306184.
- [3] W. Stawski, N. Kokott, A. Vogt, B. Esser, *in peer review*.
- [4] W. Stawski, B. Esser, *in peer review*.
- [5] W. Stawski, Y. Zhu, I. Rončević, Z. Wei, M. A. Petrukhina, H. L. Anderson, *Nat. Chem.*, **16** (2024) 998–1002.
- [6] A. Rodríguez-Rubio, H. Zhu, K. M. Cheung, I. Rončević, L. A. Gödde, J. Hergenbahn, J. L. Field, P. Gupta, W. Stawski, H. Gotfredsen, J. Straw, M. Edmondson, J. O’Shea, A. Saywell, H. L. Anderson, *Science*, **390** (2025) 290–293.

R-10

SEEING MORE, SOLVING FASTER: NEW ADVANCES IN X-RAY AND ELECTRON DIFFRACTION

Felix Hennersdorf*

Rigaku Europe SE, Hugentottenallee 167, 63263 Neu-Isenburg, Germany

**e-mail: felix.hennersdorf@rigaku.com*

Crystallography is being asked to solve harder problems faster: smaller crystals, more complex samples, higher throughput, and greater confidence in every structure. In this session, we will highlight the latest innovations from Rigaku Oxford Diffraction that help meet those demands across both electron and X-ray diffraction.

We will begin with the XtaLAB Synergy-ED, Rigaku's dedicated electron diffraction platform for 3D ED / MicroED. By combining the high-speed HyPix-ED detector, CrysAlisPro for ED software, and JEOL electron microscope technology, the system brings data collection, processing, and 3D structure determination into a single, crystallography-focused workflow. Through real-world examples, we will show how Synergy-ED extends routine structure analysis to nano- and microcrystalline samples that may be inaccessible by conventional single-crystal X-ray diffraction.

We will then turn to Rigaku's X-ray diffraction solutions based on the flexible XtaLAB Synergy platform. From microfocus and rotating anode sources to Hybrid Photon Counting detectors, these modular systems can be configured around the needs of individual laboratories and applications. We will also introduce automation tools that streamline daily operation, including the XtaLAB Synergy Flow robotic sample changer, IGH3 automated crystal centering, and the XtalCheck-S plate scanner.

Finally, we will present the PhotonJetMAX-S, a new generation of ultra-bright X-ray source designed to improve data quality, speed, and experimental throughput.

Join us to see how Rigaku's latest technologies can help crystallographers move from challenging samples to high-quality structures with greater speed, confidence, and flexibility.

R-11

NOWOCZESNE METODY ANALIZY STRUKTURY I FAZ MATERIAŁÓW: NOWE ROZWIĄZANIA XRD OFEROWANE PRZEZ FIRME SCANMAT I LANSCIENTIFIC

Patryk Wróbel

SCANMAT Sp. z o.o., ul. Zwoleńska 102D, 04-761 Warszawa

Dyfrakcja rentgenowska (XRD) pozostaje jedną z kluczowych metod stosowanych w analizie struktury krystalicznej oraz identyfikacji faz materiałów stałych. Wraz z rozwojem technologii aparaturowej, systemy XRD stają się coraz bardziej wydajne, kompaktowe i dostosowane do zróżnicowanych zastosowań – od badań podstawowych po kontrolę jakości w przemyśle. Prezentacja przybliży nowe rozwiązania XRD oferowane przez firmę Scanmat we współpracy z LANScientific.

R-12

OPROGRAMOWANIE HIGH SCORE PLUS – ZASTOSOWANIE FUNKCJI SFERYCZNYCH W MODELOWANIU ZŁOŻONYCH PRZYPADKÓW UPRIWILEJOWANEJ ORIENTACJI

Marcin Sadłowski, Piotr Jakiela, Jerzy Czachórski

Malvern PANalytical B.V. Polska, ul. Ostrobramska 101 A, 04-041 Warszawa

Funkcje (harmoniki) sferyczne (ang. spherical harmonics) wykorzystywane są w analizie danych pochodzących z dyfrakcji rentgenowskiej do modelowania/korygowania zmian intensywności refleksów wynikłych z teksturowania badanego materiału. Współczynniki modelu mogą być otrzymane podczas dopasowania profilu dyfrakcyjnego tzw. metodą Rietvelda lub obliczone osobno z figur biegunowych próbki. Model funkcji sferycznych umożliwia modelowanie bardziej złożonych przypadków uprzywilejowanej orientacji niż oparty na jednym parametrze model Marcha-Dollasa.

Literatura

- [1] A. Pesonen, M. Järvinen, K. Kurki-Suonio, *Physica Fennica*, **8** (1973) 81.
- [2] M. Ahtee, M. Nurmela, P. Suortti, M. Järvinen, *J. Appl. Cryst.*, **22** (1989) 261.
- [3] M. Järvinen, *J. Appl. Cryst.*, **26** (1993) 525.
- [4] W. A. Dollase, *J. Appl. Cryst.*, **19** (1986) 267.
- [5] T. Degen, M. Sadki, E. Bron, U. König, G. Nénert, *Journal of Powder Diffraction*, **29** Supplement S2 (2014) 13.

R-13

MOŻLIWOŚCI BADAWCZE XRD POZA WARUNKAMI OTOCZENIA

Kamil Urbański

Anton Paar Poland Sp. z o.o., ul. Osmańska 14, 02-854 Warszawa

Nowoczesna dyfrakcja rentgenowska wykracza dziś daleko poza standardowe pomiary prowadzone w warunkach otoczenia. Dzięki zaawansowanym rozwiązaniom aparaturowym jak dyfraktometr rentgenowski XRDynamic 500 wyposażony w przystawki non-ambient możliwe jest nie tylko uzyskanie najwyższej jakości danych dyfrakcyjnych, ale również śledzenie zmian zachodzących w materiałach pod wpływem różnorodnych czynników zewnętrznych.



Rys. 1. Dyfraktometr proszkowy XRDynamic 500.

Przystawki reakcyjne Anton Paar otwierają nowe możliwości badawcze zarówno w nauce podstawowej, jak i w zastosowaniach przemysłowych. Pozwalają one na szczegółowe monitorowanie zmian strukturalnych materiałów podczas ogrzewania, chłodzenia, reakcji w atmosferach gazowych czy procesów katalitycznych, dostarczając cennych informacji nieosiągalnych w klasycznych pomiarach prowadzonych w warunkach standardowych.



Rys. 2. Przystawki reakcyjne od Anton Paar.

R-14

ILLUMINATING THE FUTURE NOWA GENERACJA SYSTEMÓW DO DYFRAKCJI POJEDYNCZYCH KRYSZTAŁÓW (SC-XRD) FIRMY BRUKER

Michał Czaja

Labsoft Sp. z o.o., ul. Puławska 469, 02-844 Warszawa

Nowoczesne dyfraktometry monokrystaliczne stanowią podstawowe narzędzie w badaniach struktury materiałów krystalicznych. W prezentacji zostaną przedstawione możliwości oraz kluczowe cechy systemów D8 VENTURE i D8 QUEST firmy Bruker; zaawansowanych platform do rentgenowskiej dyfrakcji monokryształów (SC-XRD).

Kluczowym elementem dyfraktometrów D8 jest mikro-ogniskujące źródło promieniowania X z hybrydową anodą diamentową - I μ S DIAMOND II. To nowoczesne rozwiązanie stosuje blok z diamentu jako materiał odprowadzający ciepło na metalicznej anodzie, umożliwiając wygenerowanie wiązki promieniowania X o intensywności porównywalnej z tymi uzyskiwanymi dotychczas wyłącznie za pomocą źródeł z rotującą anodą. Co więcej konstrukcja źródła I μ S DIAMOND II nie wymaga chłodzenia wodą (wystarczy aktywne chłodzenie powietrzem), czyniąc to rozwiązanie dużo bardziej ekologicznym i bezpieczniejszym dla elektroniki (brak ryzyka wycieku). Źródła I μ S DIAMOND II zachowują wysoką intensywność również w przypadku promieniowania o wyższej energii, takich jak promieniowanie Ag, stwarzając zupełnie nowe możliwości badawcze.



Rys. 1. Systemy do pomiarów krystalograficznych pojedynczych kryształów (SC-XRD) firmy Bruker: D8 QUEST (po lewej) oraz D8 VENTURE (po prawej).

Dyfraktometry D8 stosują najnowocześniejsze detektory typu CPAD, PHOTON IV, wprowadzając zupełnie inny sposób detekcji promieniowania X, niż w standardowych detektorach HPC. Dzięki zastosowaniu konwersji fotonów poprzez warstwę scyntylatorów możliwe jest efektywne rejestrowanie promieniowania o dowolnej energii (również ze źródeł Ag). Konstrukcja detektorów PHOTON IV kompletnie minimalizuje błąd paralaksy, zapewniając lepsze odwzorowanie struktury krystalicznej badanych próbek.

R-15

PREZENTACJA DYFRAKTOMETRÓW FIRMY PROTO MANUFACTURING

Andrzej Wojtas

*PROTO Manufacturing Europe Sp. z o.o. / METLAB Sp. z o.o.
ul. Awicenny Ibn Siny 14, 54-611 Wrocław*

Od założenia w 1967 roku firma Proto Manufacturing Ltd. opracowuje nowoczesne instrumenty do charakteryzacji materiałów. Nasza linia produktów obejmuje szeroką gamę dyfraktometrów rentgenowskich (XRD): systemy pomiaru naprężeń własnych i austenitu szczątkowego, dyfraktometry proszkowe, dyfraktometry Laue do orientacji monokryształów oraz dyfraktometry o wysokiej rozdzielczości. Ponadto dostarczamy lampy rentgenowskie i sprzęt dostosowany do indywidualnych potrzeb klientów. Od ponad 30 lat dostarczamy systemy pomiarowe dla środowisk laboratoryjnych, fabrycznych i terenowych. Nasi przeszkoleni specjaliści oferują również usługi pomiarowe w naszych laboratoriach w USA, Kanadzie i w Polsce, akredytowanych ISO/IEC 17025:2017.

NAPRĘŻENIA WŁASNE I AUSTENIT SZCZĄTKOWY. Oferujemy szeroką gamę dyfraktometrów do pomiaru naprężeń własnych, aby zapewnić sprzęt najbardziej odpowiedni do Twoich potrzeb: szybkie systemy laboratoryjne LXRD, elastyczne systemy iXRD® Portable, lekkie systemy iXRD Mini, innowacyjne systemy roboXRD lub wszechstronne systemy mXRD® Ultra-Portable.

DYFRAKCJA PROSZKOWA. Nasze wysokiej klasy dyfraktometry proszkowe zostały opracowane, aby zapewnić najlepsze rozwiązanie dla Twoich potrzeb. Wybierz spośród naszych systemów stacjonarnych, kompaktowych modeli podłogowych lub bogato wyposażonych systemów laboratoryjnych. Nasze dyfraktometry proszkowe, wyposażone w wydajne detektory zliczające fotony, charakteryzują się niezwykle szybkim poborem danych, a jednocześnie podają bardzo dokładne wyniki. Linia produktów AXRD® zapewnia lata wygody i wartości nawet w najbardziej wymagających badaniach materiałów metodą dyfrakcji rentgenowskiej.

NIESTANDARDOWA DYFRAKCJA. Jeśli potrzebujesz dyfraktometru do bardzo niestandardowego zastosowania, możemy opracować unikalne rozwiązanie dla Twoich potrzeb. Nasze konfigurowalne produkty obejmują dyfraktometry proszkowe, systemy monokrystaliczne i wiele innych opcji, które mogą pomóc w Twoich zastosowaniach.

DYFRAKTOMETRY LAUE – ORIENTACJA MONOKRYSZTAŁÓW. Mamy szereg możliwości orientowania monokryształów. Nasz laboratoryjny system Laue-COS idealnie nadaje się do orientowania i cięcia kryształów w laboratoriach badawczo-rozwojowych. Alternatywnie, nasze szybkie systemy Laue-HT są przeznaczone do środowisk kontroli na poziomie produkcyjnym, takich jak zakłady odlewnicze monokrystalicznych łopatek turbin.

LAMPY RTG. Produkujemy szeroką gamę wysokiej jakości lamp rentgenowskich. Nasz zakład produkujący lampy rentgenowskie może również tworzyć niestandardowe projekty do XRD, XRF lub obrazowania.

USŁUGI POMIAROWE. Powierz swoje potrzeby w zakresie pomiarów dyfrakcji rentgenowskiej naszemu wysoko wykwalifikowanemu i kompetentnemu zespołowi.

R-15

Nasze akredytowane laboratoria zachowują najwyższe standardy jakości i dokładnie przestrzegają wszystkich procedur, zapewniając dokładne zbieranie i przetwarzanie danych. Dzięki ponad 25 dedykowanym systemom XRD możemy zaspokoić Twoje potrzeby w zakresie pomiarów laboratoryjnych i terenowych, zapewniając szybkość, dokładność i wydajną obsługę.

Akredytacja ISO/IEC 17025:2017

Zarejestrowany w ITAR

Towary kontrolowane zarejestrowane

R-16

LABORATORIUM ZAAWANSOWANYCH TECHNIK RENTGENOWSKICH (LAXT-AGH): NOWA PLATFORMA DO WIELOTECHNIKOWEJ CHARAKTERYZACJI MATERIAŁÓW

Sebastian Wroński

*Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Katedra Fizyki Materii Skondensowanej*

Na AGH w Krakowie uruchomiono Laboratorium Zaawansowanych Technik Rentgenowskich (LAXT-AGH), wyposażone w wysokobrylantne źródło promieniowania rentgenowskiego typu MetalJet pracujące z liniami $\text{In K}\alpha$ (24,1 keV) oraz $\text{Ga K}\alpha$ (9,2 keV). Dzięki modułowej konstrukcji stanowiska oraz zastosowaniu wymiennych układów optycznych i różnych systemów detekcyjnych możliwa jest realizacja szerokiego zakresu eksperymentów z zakresu charakteryzacji materiałów.

Laboratorium umożliwia prowadzenie badań z wykorzystaniem wysokorozdzielczej tomografii rentgenowskiej, obrazowania fazowego, mapowania fluorescencji rentgenowskiej (XRF), dyfrakcji kątowno-dydispersyjnej oraz dyfrakcji energetycznej (EDD), a także badań in-situ z zastosowaniem stanowiska wytrzymałościowego. System wyposażono w detektory płaskie, detektory hybrydowe zliczające fotony oraz detektory SDD i CdTe przeznaczone do badań spektroskopowych i dyfrakcyjnych.

Wyjątkowo wysoka jasność źródła MetalJet oraz elastyczna konfiguracja aparatury umożliwiają realizację eksperymentów inspirowanych technikami synchrotronowymi w warunkach laboratoryjnych. W prezentacji przedstawiona zostanie infrastruktura laboratorium oraz pierwsze przykłady zastosowań obejmujące trójwymiarowe obrazowanie i wielomodową charakteryzację nowoczesnych materiałów.

WHICH METAL SHOULD I BIND? METAL-BINDING, STRUCTURE AND FUNCTION OF *ARABIDOPSIS THALIANA* ACETYLORNITHINE DEACETYLASE

Maciej Nielipiński^{1,2}, Agnieszka J. Pietrzyk-Brzezińska¹, Bartosz Sekuła¹

¹ *Institute of Molecular and Industrial Biotechnology, Faculty of Biotechnology and Food Sciences, Lodz University of Technology, ul. Stefanowskiego 2/22 90-537 Łódź*

² *Interdisciplinary Doctoral School, Lodz University of Technology, ul. Żeromskiego 116, 90-543 Łódź*

Arginine is a key nitrogen storage molecule in plants, hence its metabolism is crucial for overall plant development. Its production starts with ornithine, which putatively can be introduced into arginine metabolism via two distinct pathways – cycling and linear (fig. 1A). The cycling pathway utilises N-acetylornithine glutamate acetyltransferase (NAOGAT) to create ornithine and regenerate acetylglutamate. While the structure of cycling pathway enzyme has been recently elucidated [1], the linear pathway enzymes were not yet characterised.

The presence of linear pathway in plants is still discussed, as it is believed to be characteristic for enteric and thermophilic bacteria and archea, and yeast, rather than plants. Nevertheless, plants possess an enzyme believed to be acetylornithine deacetylase (AOD, fig. 1B) [2]. It is putatively responsible for deacetylation of acetylornithine with acetyl molecule release – without acetylglutamate regeneration. However, recently its main activity has been put under investigation, as it has been shown to be capable of complementing Cys-Gly dipeptidase knock-out yeast mutants [3].

For most of the known homologs the active site contains either two zinc ions or zinc and cobalt [4]. To identify the metals in *AtAOD* active site we employed multi-level analysis relying on geometry, anomalous dispersion and biochemical data. The study reveals that due to unique composition of active site *AtAOD* prefers binding iron (fig. 1C) over zinc or manganese.

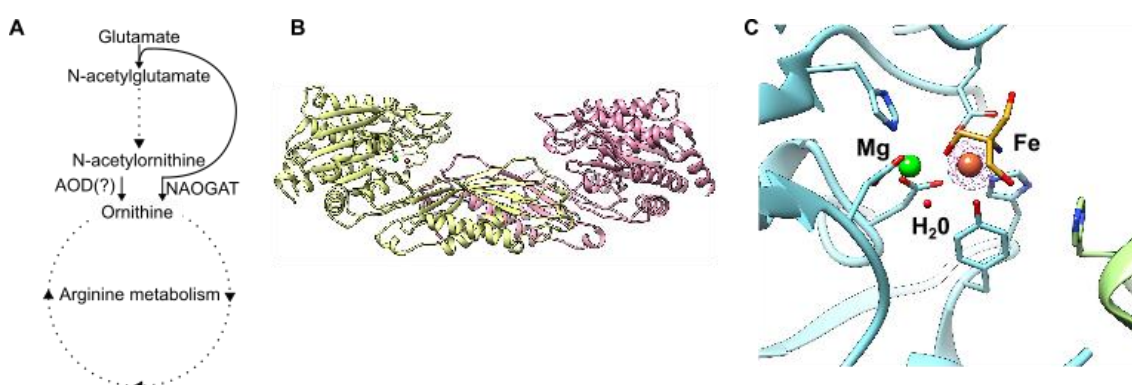


Fig. 1. A) Schematic representation of arginine metabolism organization. B) Side-view of *AtAOD* dimer, C) *AtAOD* bimetallic active site with magnesium and iron bound with anomalous map contoured at 3σ .

R-17

Here we present structures of the linear pathway enzyme from *Arabidopsis thaliana* with different composition of their bimetallic active site along PDB-wide query of metal binding geometry. Additional analyses reveal discrepancies between known paralogs and the plant protein, as well as database annotation and experimental results, and dependence of active site composition on protein production environment.

This project was supported by the National Science Centre, grant SONATA 2021/43/D/NZ1/00486. This work was completed when the author MN was Doctoral Candidate in the Interdisciplinary Doctoral School at the Lodz University of Technology, Poland.

Literature

- [1] M. Nielipiński, A. J. Pietrzyk-Brzezińska, A. Twarda-Cłapa, B. Sekuła, Manuscript under review (2026).
- [2] B. Molesini, G. Mennella, F. Martini, G. Francese, T. Pandolfini. *Plant Cell Physiol.*, **56**(6) (2015) 1084–1096.
- [3] S. Miyaji, T. Ito, T. Kitaiwa, K. Nishizono, S-I. Agake, H. Harata, H. Aoyama, M. Umahashi, M. Sato, J. Inaba, S. Fushinobu, T. Yokoyama, A. Maruyama-Nakashita, M. Y. Hirai, N. Okhama-Otsu. *The Plant Journal*, **118** (2024) 1603–1618.
- [4] A. Paul, S. Mishra, *JBIC*, **26** (2021) 569–582.

UNUSUAL ENANTIOMERIC CRYSTAL FORMS OF N-CYCLOALKYL-4-METHYL-2,2-DIOXO-1H-2λ⁶,1- BENZOTHIAZINE-3-CARBOXAMIDES AND THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY

Svitlana Shishkina¹, Igor Ukrainets²

¹ *Institute of Organic Chemistry, NAS of Ukraine, Akademik Kukhar Street 5, Kyiv, Ukraine*

² *National University of Pharmacy, 53 Pushkinska str., Kharkiv 61002, Ukraine*

The studied *N*-cycloalkyl-4-methyl-2,2-dioxo-1H-2λ⁶,1-benzothiazine-3-carboxamides (cycloalkyl moiety = cyclopropyl, cyclobutyl, cyclopentyl, cyclohexyl, cycloheptyl, cyclooctyl) are not chiral molecules, but they can crystallize as a true racemic form as well as an enantiomorphic crystal pairs. The racemic crystals contain molecules of two conformation types, which are symmetric to each other with respect to an inversion center or a mirror plane (Fig. 1). The appropriate choice of a solvent and crystallization conditions allows to obtain pure enantiomeric crystals containing molecules of one conformational type only. Enantiomorphic crystal pairs differ in the type of molecule conformations found in them. Being enantiomeric, such crystals have the same unit cell parameters and can be recognized only using the single crystal X-ray diffraction study due to anomalous dispersion. We were able to show that it is the most plausible that the

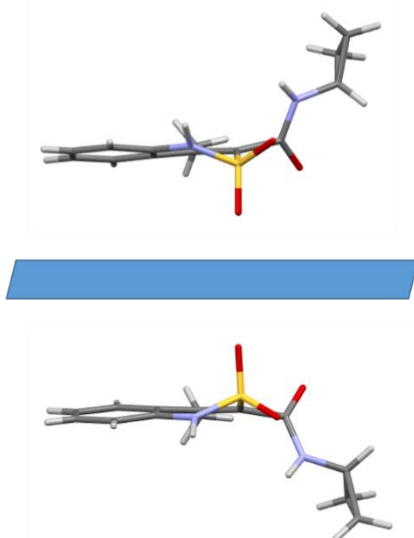


Fig. 1. Molecular conformations in enantiomeric crystals.

ability of 1,2-benzothiazines to form chiral crystals is caused by the fact that two oxygen atoms of the sulfonyl group are non-equivalent in their hydrogen bonds formation ability. Such a non-equivalence of formally equal oxygen atoms results in an asymmetry of the sulfur atom. Thus, the formation of intermolecular interactions turns the sulfur atom into a stereogenic center.

Similar to chiral molecules, the enantiomorphic crystals revealed a significant difference in their biological properties. Our study showed that the analgesic activity is independent on the molecular or crystal structure. In contrary, the diuretic activity proved to depend on the size of the cycloalkyl substituent in the case of racemic crystal forms. In all the enantiomorphic pairs, the crystals containing conformer **B** have a much stronger diuretic effect as compared to the crystals containing the mirrored conformer **A**. Thus, knowledge of the exact crystal

form proves to be of a great importance for all developments and improvements of drugs that contain the sulfonyl group.

PYRIMIDINE-BASED ANTIMICROBIAL PLATFORMS: FROM URACIL FUNCTIONALIZATION TO SILVER(I)-MEDIATED BIOACTIVITY

Chris H. J. Franco*

Institute of Low Temperature and Structure Research, PAS, Okólna 2, 50-422 Wrocław

**e-mail: c.franco@intibs.pl*

Pyrimidine derivatives represent an important class of bioactive molecules owing to their structural versatility, hydrogen-bonding ability, and relevance in medicinal chemistry [1,2]. In this work, we present a research line focused on the rational design of antimicrobial pyrimidine-based systems through two complementary strategies: **(i)** Organic functionalization of uracil derivatives [1] and **(ii)** Metal coordination with silver(I) [2]. In the first approach, a series of functionalized uracil derivatives bearing amino, chloro, thioxo, methyl, formimidamide, and carboxymethyl groups were synthesized and structurally investigated. Single-crystal X-ray diffraction, Hirshfeld surface analysis, energy framework calculations, and solubility studies revealed that subtle changes in the uracil core strongly affect hydrogen-bonding motifs, crystal packing, lattice stabilization, and antibacterial response. In the second approach, the pyrimidine scaffold was expanded into coordination chemistry through the self-assembly synthesis of a silver(I) complex with 2,4-diamino-6-chloropyrimidine. The resulting Ag(I)-pyrimidine compound exhibited a linear N–Ag–N coordination environment, supramolecular stabilization, good stability in aqueous and saline media, and gradual Ag⁺ release. Biological assays demonstrated antimicrobial activity against Gram-positive and Gram-negative bacteria, as well as antifungal and antileishmanial effects. These studies show that pyrimidine scaffolds can be rationally tuned by functionalization or metal coordination to control solubility, supramolecular organization, stability, and antimicrobial activity, providing a versatile platform that evolves from organic derivatives to Ag(I)-based systems with controlled Ag⁺ release.

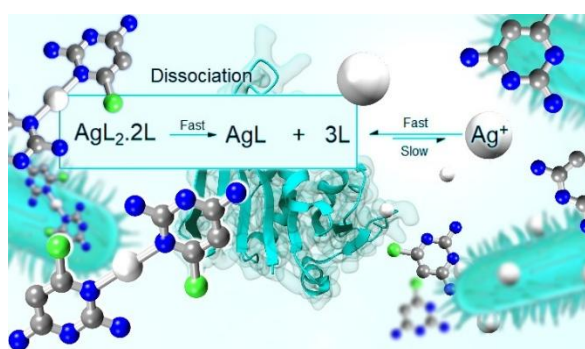


Fig. 1. Pyrimidine-based metal complexes emerge as potent bioactive agents, surpassing the activity of free pyrimidines.

Literature

- [1] S. Mal, C. H. J. Franco, B. Kumar, A. M. Kirillov, S. Das, *CrystEngComm*, **27** (2025) 3456–3466.
 [2] S. Mal, S. Das, T. Das, C. H. J. Franco, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **29** (2026) e70215.

RARE-EARTH BASED ICOSAHEDRAL QUASICRYSTALS WITH LITHIUM

Ireneusz Buganski¹, Stanislav Vrtnik^{2,3}, Radoslaw Strzalka¹, Andreja Jelen², Sandra Drev², Janusz Wolny¹, Nobuhisa Fujita⁴

¹*Faculty of Physics and Applied Computer Science, AGH University of Krakow, Al. Mickiewicza 30, Krakow, 30-059, Poland*

²*Jozef Stefan Institute, Jamova 39, Ljubljana, SI-1000, Slovenia*

³*Faculty of Mathematics and Physics, University of Ljubljana, Jadranska 19, Ljubljana, SI-1000, Slovenia*

⁴*Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, Sendai, 980-8577, Japan*

Rare-Earth (RE) based Bergman quasicrystals constitute an important group of 3D quasicrystals. We plan to discuss the structural refinement of ZnMgEr phase [1] that will have consequences for elemental substitution in search for the magnetically ordered quasicrystal.

Long-range magnetic order, both ferromagnetic and antiferromagnetic, was discovered in Tsai type icosahedral quasicrystals [2,3]. Inspired by this research, we started searching for magnetic order in remaining classes of icosahedral quasicrystals, particularly Zn-Mg-RE Bergman type family. Since all Zn-Mg-RE quasicrystals are spin-glass phases, we incorporated the idea of tuning RKKY interaction through doping and made a substitution of Mg(II) to Li(I).

Samples of ZnMg(Dy, Er, Ho, Tm)Li were prepared with a self-flux method by replacing 5 at.% of Mg in the original melt with Li [4]. That resulted in the formation of the faceted quasicrystals exhibiting icosahedral morphology (Fig. 1). By means of the single-crystal X-ray diffraction, we could determine that the substitution site is the RE atom located in the center of local Tsai clusters. Therefore, the addition of Li does not only replace the magnetism-bearing atom, but also decreases the number of valence electrons as $RE^{3+} \Rightarrow Li^{1+}$. Magnetic properties are now under study.

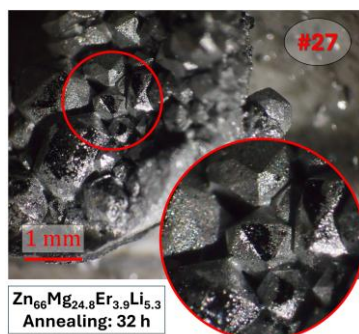


Fig. 1. The morphology of ZnMgErLi grain.

Literature

- [1] I. Buganski et al., *Acta Cryst. B*, **82** (2026) 175–185.
- [2] R. Tamura et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **143** (2021) 19938–19944.
- [3] R. Tamura et al., *Nat. Phys.*, **21** (2025) 974–979.
- [1] I. Buganski et al., *Acta Cryst. A*, **82** (2026) 108–117.

R-21

DATA REDUCTION OF F-TYPE ICOSAHEDRAL QUASICRYSTAL

Maciej Żak, Radosław Strzałka

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, AGH w Krakowie

In my presentation, I will give an overview of how to perform a complete process of XRD data treatment of an icosahedral quasicrystal single-crystalline sample using CrysAlis^{Pro} software provided by Rigaku. The procedure involves a hand-selection of icosahedral reciprocal space vector basis, indexation of diffraction reflections' positions, and integration of reflections' intensities using the RED module of CrysAlis^{Pro}. Diffraction pattern of icosahedral quasicrystals can only be indexed with a 6D vector basis, which requires non-standard analysis in diffraction analysis. CrysAlisPro is a unique (and the only one) tool that enables the complete diffraction analysis of aperiodic crystals [1].

We focused on the icosahedral system of ZnMgRE (RE={Y,Tb,Dy,Ho,Er,Tm}) family with F-type centering of a 6D unit cell and Bergman-type atomic clusters in the atomic structure. This system is particularly interesting in search of magnetism of Bergman-type quasicrystals [2,3]. Recently, a detailed analysis of the influence of the RE element on structural disorder in this system was performed [4] (see a poster by R. Strzałka *et al.*), to which project my analysis contributed. The samples were prepared by I. Bugański using a self-flux method, and the XRD data were collected by J. Kusz using an Agilent SuperNova diffractometer with an Atlas CCD detector. The measurement was carried out at 100 K with a Mo lamp.

The CrysAlis^{Pro} software was shared by Rigaku upon request.

Literature

- [1] Rigaku Oxford Diffraction (2023). CrysAlisPro (Version 1.171.42.84a) [Computer software]. Rigaku Corporation, Oxford, UK. <https://rigaku.com/products/crystallography/x-ray-diffraction/crysalispro>.
- [2] S. Vrtnik *et al.*, Non-ergodic states in icosahedral quasicrystals Zn-Mg-RE (RE = Tm, Er, Ho) (2025), conference contribution; S. Vrtnik, *et al.*, Magnetic properties of Bergman-type icosahedral Zn-Mg-Tm quasicrystals (2025), conference contribution.
- [3] I. Buganski *et al.*, *Acta Cryst. B*, **82** (2026) 175.
- [4] R. Strzałka, M. Żak, I. Bugański, J. Wolny, *in preparation*.

NOWY HYBRYDOWY KRYSZTAŁ ORGANICZNO-HALOGENKOWY: CHARAKTERYSTYKA WZROSTU I WŁAŚCIWOŚCI SCYNTYLACYJNE

Daniel M. Kamiński¹, Arkadiusz Matwijczuk², Klaudia Rząd², Andrzej Górecki³, Radosław Zaleski⁴

¹ Faculty of Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, 20-031 Lublin, Poland

² Faculty of Biophysics, University of Life Sciences, 20-950 Lublin, Poland

³ Faculty of Biochemistry, Biophysics and Biotechnology, Department of Physical Biochemistry, Jagiellonian University, Gronostajowa 7, 30-387 Kraków, Poland

⁴ Faculty of Biochemistry, Biophysics and Biotechnology, Department of Physical Biochemistry, Jagiellonian University, Gronostajowa 7, 30-387 Kraków, Poland

Kryształy scyntylacyjne są sercem detektorów promieniowania – od zaawansowanej medycyny (tomografia PET) po systemy bezpieczeństwa i fizykę cząstek. Działają jak światła ostrzegawcze: im szybciej "mruwną" po uderzeniu promieniowania, tym lepiej i precyzyjniej działa całe urządzenie. Niestety, obecnie używane standardy, takie jak kryształy CsI(Tl), są zbyt wolne, co ogranicza szybkość i rozdzielczość nowoczesnych skanerów. Czas ich emisji jest mierzony w mikrosekundach, co staje się głównym hamulcem technologicznym. Odpowiedzią na to wyzwanie jest zupełnie nowa klasa materiałów wprowadzająca rewolucyjne podejście funkcjonalne, w którym nieorganiczna struktura nośna efektywnie absorbuje promieniowanie jonizujące, a wprowadzony w jej sieć krystaliczną organiczny domieszka błyskawicznie emituje sygnał świetlny (Rys. 1). Osiągnięciem tej nowej generacji kryształów jest uzyskanie czasu emisji aż o dwa rzędy wielkości krótszego w porównaniu do powszechnie stosowanych standardów komercyjnych. Spektakularnym dowodem skuteczności tej strategii jest nowo zsyntetyzowany, hybrydowy kryształ organiczno-halogenkowy opisany w renomowanym czasopiśmie *Crystal Growth & Design*.



Rys. 1. Kryształ hybrydowy CsI (Fluorofor) jako nowej generacji materiał do budowy scyntylatorów (po lewej) Fluorescencja kryształu po naświetleniu promieniowaniem UV 254nm (po prawej).

Ten wysokiej jakości monokryształ, uzyskany w postaci półcentymetrowych bloków o doskonałej przezroczystości optycznej, wykazuje unikalną strukturę oraz superszybki czas odpowiedzi w zakresie nanosekundowym, stanowiąc bezpośredni

R-22

przełom nad dotychczasowymi materiałami domieszkowanymi talem (CsI:Tl). Przełomowe możliwości, jakie daje to nowatorskie podejście, tkwią w unikalnej metodzie wytwarzania. Zastosowanie autorskiej, zaawansowanej technologii kontrolowanego wzrostu kryształów z roztworu pozwala na powtarzalne, jednorodne i stabilne wbudowywanie delikatnych cząsteczek organicznych bezpośrednio w gęstą matrycę CsI. Pierwsze pomiary dyfrakcyjne tego nowego materiału są niezwykle obiecujące – charakterystyka dyfrakcji rentgenowskiej (PXRD) jednoznacznie potwierdza wysoką czystość fazową, doskonałe zachowanie dalekiego uporządkowania sieciowego oraz minimalny wpływ domieszki na naprężenia strukturalne matrycy. Choć na obecnym etapie zidentyfikowano fizykochemiczne wyzwanie w postaci silnego wygaszania fluorescencji przez ciężkie jony jodkowe, problem ten jest w pełni rozwiązywalny. Zakłada całkowite przezwyciężenie tego zjawiska poprzez ukierunkowaną inżynierię molekularną i modyfikację struktury chemicznej fluoroforu. Niezwykle ważnym elementem optymalizacji tego procesu jest równoległe zastosowanie zaawansowanej spektroskopii badania czasów życia pozytonów (PALS). Ta czuła metoda pozwala na bezprecedensową, nanoskopową charakterystykę wolnych objętości oraz defektów punktowych, dając pełną kontrolę nad strukturą. Ta nowa strategia jednoznacznie dowodzi, że stabilne kryształy hybrydowe stanowią materiał o ogromnym potencjale aplikacyjnym i wdrożeniowym dla systemów detekcji przyszłości.

Literatura

- [1] D. M. Kamiński, A. Matwijczuk, K. Rząd, A. Górecki, R. Zaleski, Growth and Scintillation Characteristics of a New Organo–Halide Hybrid Crystal, *Cryst. Growth Des.*, **26**(2) (2026) 853–860.

STRUCTURAL FLEXIBILITY AND PHASE BEHAVIOUR OF HYBRID MOLECULAR METAL HALIDES

Anna Gagor, Mirosław Mączka, Dawid Drozdowski, Magdalena Rowińska

*Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego
Polskiej Akademii Nauk, ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław*

Organic-inorganic hybrid materials combine desirable features, including facile synthesis, cost-effectiveness, and tuneable electrical, electronic, and optical properties. Owing to the interplay between flexible organic moieties and metal-halide polymeric units, these compounds frequently display pronounced temperature-driven polymorphism. The resulting structural diversity is often accompanied by a broad range of physical phenomena, highlighting their potential for multifunctional applications [1]. For example, metal iodides are distinguished by narrow band gaps, efficient photovoltaic response, and reversible thermochromic behaviour [2].

The rational design of hybrid metal halides with targeted properties remains a significant challenge due to the multitude of factors influencing structural phase transitions and atomic arrangements. Key molecular factors include symmetry, size, dipole moment, and dynamics, whereas dimensionality, flexibility, and distortions govern the inorganic framework. In this contribution, I will discuss selected examples of organic-inorganic hybrid materials, with particular emphasis on temperature-induced polymorphism, reconstructive phase transitions, recrystallization, and self-healing processes. Attention will be focused on the molecular mechanisms underlying phase transitions and structure-property relationships, as well as on the pivotal role of supramolecular interactions, especially hydrogen bonding and halogen···halogen contacts in stabilizing distinct polymorphic forms and tuning their electrical, electronic, and optical responses.

Literature

- [1] B. Saparov and D. B. Mitzi, *Chem. Rev.*, **116** (2016) 4558.
- [2] M. Mączka, J. K. Zareba, A. Gagor, D. Stefańska, M. Ptak, K. Roleder, D. Kajewski, A. Soszyński, K. Fedoruk, A. Sieradzki, *Chem. Mater.*, **33** (2021) 2331.

UNRAVELLING THE LOCAL STRUCTURE IN SILVER HYPODIPHOSPHATE WITH 3D ED

Dorota A. Kowalska¹, Vasyl Kinzhybalo¹, Jakub Wojciechowski²,
Vladyslav Maliuzhenko³, Katarzyna Ślepokura³

¹ Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences,
Okólna 2, 50-422 Wrocław, Poland

² Rigaku Europe SE, Hugenottenallee 167, Neu Isenburg, D-63263, Germany

³ Faculty of Chemistry, University of Wrocław, 14 F. Joliot-Curie, 50-383 Wrocław,
Poland

Three-dimensional electron diffraction (3D ED) was used to determine the crystal structure of silver hypodiphosphate, $\text{Ag}_4(\text{P}_2\text{O}_6)$. Its average hexagonal structure belongs to the $P6_3/mcm$ space group and is isomorphous with the average structure of $\text{Li}_4(\text{P}_2\text{S}_6)$ [1]. Silver cations form hexagonal atomic ring layers, while the channels at the centre of each ring are occupied by hypodiphosphate anions, whose P–P bonds align along the unique c axis. The $\text{P}_2\text{O}_6^{4-}$ anions exhibit disorder: phosphorus atoms occupy two distinct positions with 50% occupancy each, sharing common oxygen atoms (Fig. 1a) that form an octahedral coordination environment around the silver cations. Neighbouring columns exhibit correlated disorder, where P–P bonds align either at the same level (ferro-type) or at alternating levels (antiferro-type), resulting in diffuse scattering on hkl layers with odd l values (Fig. 1b). Simulations using a geometrically frustrated Ising-type model closely match the experimental data, elucidating the short-range antiferro-like arrangement of the disordered anions [2].

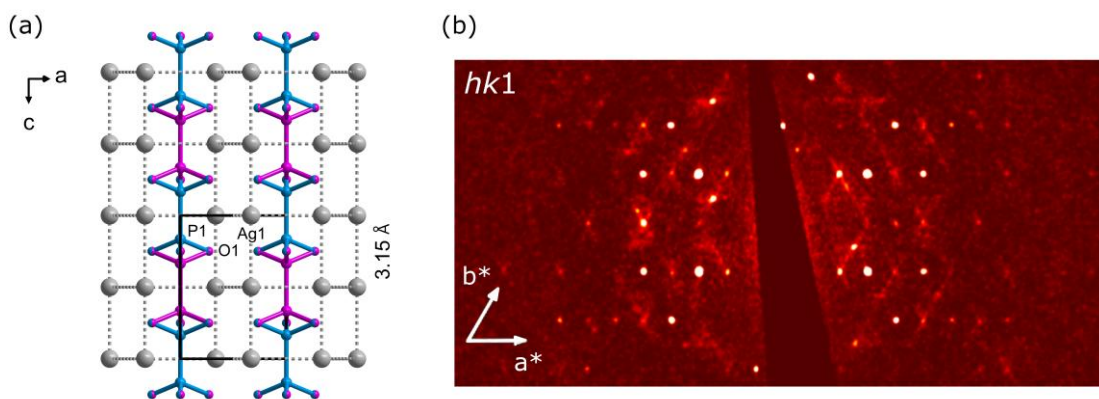


Fig. 1. Crystal structure packing view of $\text{Ag}_4(\text{P}_2\text{O}_6)$ along b axis as an average structure with two possible arrangements of the hypodiphosphate anions, shown in violet and blue colours, (a) and diffuse scattering streaks on $hk1$ reciprocal plane (b).

Literature

- [1] R. Mercier, J. P. Malugani, B. Fahys, J. Douglanle, G. Robert, *J. Solid State Chem.*, **43** (1982) 151–162. DOI: 10.1016/0022-4596(82)90224-9
[2] V. Kinzhybalo, J. Wojciechowski, D. A. Kowalska, V. Maliuzhenko, K. A. Ślepokura, *Acta Cryst. C*, **82** (2026) 277–284. DOI: 10.1107/S2053229626005012

PLAKATY – SESJA A
POSTERS – SESSION A

A-1

STRUCTURE DETERMINATION OF PUTRESCINE N-METHYLTRANSFERASE FROM *NICOTIANA TABACUM*

**Kacper Zielak, Agnieszka J. Pierzyk-Brzezinska, Maciej Nielipiński,
Bartosz Sekula**

*Institute of Molecular and Industrial Biotechnology, Faculty of Biotechnology and Food
Sciences, Lodz University of Technology, Stefanowskiego 2/22, 90-537*

One of the enzymes participating in the biosynthetic pathway of nicotine and other tropane alkaloids, is putrescine N-methyltransferase (PMT). It belongs to the transferase class catalysing methylation of one amine group of putrescines (PUT), using S-adenosylmethionine (SAM) as a methyl group donor [1]. Phylogenetic analysis confirms that PMT clusters within the same protein superfamily as aminopropyltransferases, supporting their evolutionary relatedness within polyamine biosynthesis enzymes [2].

Due to the lack of structural information on plant PMT, we aimed to determine its structure. We successfully resolved the structure of *Nicotiana tabacum* PMT1 (*NtPMT1*) at a resolution of 2.03 Å. The protein is built of two distinct domains: an N-terminal domain (residues 86-139) and a C-terminal domain (residue 86-139). The smaller N-terminal domain appears to stabilise protein structure, whereas the larger C-terminal domain is responsible for catalytic activity and which accommodates both the substrate (PUT) and the cofactor (SAM) within the active site.

The catalytic reaction is based on the SN₂ mechanism, where a methyl group is directly transferred from SAM to the amine group of putrescines. Structural analysis of *NtPMT1* revealed a loop region that, similarly to other homologous proteins, can switch between open and closed states during the catalysis. These results indicate that this loop likely regulates substrate entry and proper positioning of the cofactor [3].

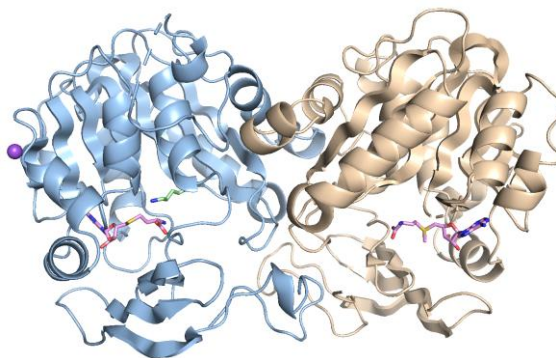


Fig. 1. Structure of *NtPMT1* with putrescine and S-adenosylhomocysteine, as ligands in active centre.

Acknowledgement

This research was funded by National Science Centre, Poland grant Sonata 17 2021/43/D/NZ1/00486.

Literature

- [1] A. Junker, J. Fischer, Y. Sichhart, W. Brandt, B. Dräger, *Front. Plant Sci.*, **4** (2013) 56977.
- [2] E. G. Minguet, F. Vera-Sirera, A. Marina, J. Carbonell, M. A. Blázquez, *Mol. Biol. Evol.*, **25** (2008) 2119.
- [3] B. Sekula, Z. Dauter, *Front. Plant Sci.*, **10** (2019) 458506.

REVERSE TRANSCRIPTASES: SIMILAR STRUCTURE, DIFFERENT MECHANISM OF ACTION

**Elżbieta Nowak^{1,2}, Marzena Nowacka^{2,3}, Chandrasekaran Prabakaran²,
Justyna Jackiewicz^{1,2}, Marcin Nowotny²**

¹ *Preclinical Drug Development Facility (IN-MOL-CELL), International Institute of Molecular and Cell in Warsaw, Ks. Trojdena 4, Poland*

² *Laboratory of Protein Structure, IIMCB, Ks. Trojdena 4, Poland*

³ *Laboratory of Protein Engineering, Mossakowski Medical Research Institute, Polish Academy of Sciences, Pawinskiego 5, 02-106 Warsaw, Poland*

Reverse transcriptases (RTs) are essential enzymes that catalyze the conversion of single-stranded RNA into double-stranded DNA [1], a central step in the life cycle of retroviruses, retrotransposons, and related viruses. Despite a conserved structural core—most notably the canonical “right-hand” DNA polymerase architecture—RTs employ diverse mechanistic strategies that depend on their evolutionary origin, oligomeric state, and substrate interactions.

Here, we integrate structural and biochemical data from multiple RT systems, including retroviral, (XMRV) [2], retrotransposon (Ty3) [3], foamy viral protease-reverse transcriptase (PR-RT) [4], and pararetroviral Cauliflower mosaic virus (CaMV) RT [5]. Across these enzymes, substrate recognition near the polymerase active site is highly conserved, but major differences emerge in RNase H organization, enzyme oligomerization, and coordination of catalytic activities.

Ty3 RT forms a substrate-induced asymmetric homodimer in which DNA polymerase and RNase H activities are separated between the two subunits, providing functional specialization. In contrast, retroviral RTs such as HIV-1 operate as heterodimers, with both catalytic functions residing within a single subunit, while the second subunit serves a structural role. Monomeric RTs of gammaretroviruses (e.g., XMRV) exhibit a flexible RNase H domain that becomes ordered only upon substrate binding, enabling dynamic regulation of RNA cleavage.

Foamy viral PR-RT introduces further complexity by displaying substrate-dependent oligomerization: it binds RNA/DNA as a monomer but forms asymmetric dimers on dsDNA. Extending this paradigm, structural and biochemical characterization of CaMV RT reveals yet another distinct mechanism. CaMV RT forms a stable monomeric complex with RNA/DNA and is fully competent for DNA polymerization as a single subunit. However, efficient RNase H activity requires transient association of a second RT molecule, indicating a division of function that is dynamic rather than structurally fixed. Notably, the RNase H domain in CaMV RT adopts an inactive conformation in the monomeric complex, and RNA cleavage occurs only upon recruitment of an additional molecule positioned by the polymerase-bound enzyme.

Across all systems, differences in substrate trajectory, RNase H positioning, and interdomain communication lead to distinct spacing between polymerase and cleavage sites, thereby shaping catalytic timing and coordination. Collectively, these findings highlight that RTs share a conserved structural organization but utilize fundamentally different mechanistic solutions—from stable dimers to transient assemblies and highly mobile domains—to accomplish reverse transcription.

A-2

Literature

- [1] F. Crick, *Nature*, **227** (1970) 561.
- [2] E. Nowak et al., *Nucleic Acids Res.*, **41**(6) (2013) 3874–87.
- [3] E. Nowak et al., *Nat. Struct. Mol. Biol.*, **21** (2014) 389.
- [4] M. Nowacka et al., *J Virol.*, **95**(18) (2021) e0084821.
- [5] Ch. Prabakaran et al., *J. Biol. Chem.*, **300**(8) (2024) 107555.

A-3

DECIPHERING THE FUNCTION OF TBC1D17 RAB-BINDING DOMAIN (RBD) – IMPLICATIONS FOR INHIBITOR SYNTHESIS

Dominika Nielipińska¹, Dominika Rubiak², Marta Orlikowska³, Katarzyna Błażewska², Agnieszka Pietrzyk-Brzezińska¹, Edyta Gendaszewska-Darmach¹

¹ *Institute of Molecular and Industrial Biotechnology, Lodz University of Technology, ul. Stefanowskiego 2/22, 90-537 Lodz*

² *Institute of Organic Chemistry, Lodz University of Technology, ul. Żeromskiego 116, 90-543 Lodz*

³ *Department of Biomedical Chemistry, University of Gdansk, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdansk*

GTPase-activating proteins (GAPs) are a diverse family of regulators that recognize Rab GTPases and promote their inactivation. The common feature of all GAPs is the presence of TBC (Tre-2/Bub-2/Ccd16) domain, with two highly conserved motifs IxxDxxR and YxQ engaged in GTP hydrolysis. Up until now, abnormal activity of Rabs has been connected with the prevalence of neurodegenerative diseases, cancer, immune disorders, and type 2 diabetes [1]. This positions the small GTPases as promising molecular targets for the treatment of these diseases. Unfortunately, the lack of a well-defined binding pocket suitable for small molecules makes them challenging therapeutic candidates. However, it is possible to influence their activity through their regulatory proteins – GEF, GDI and GAP [2].

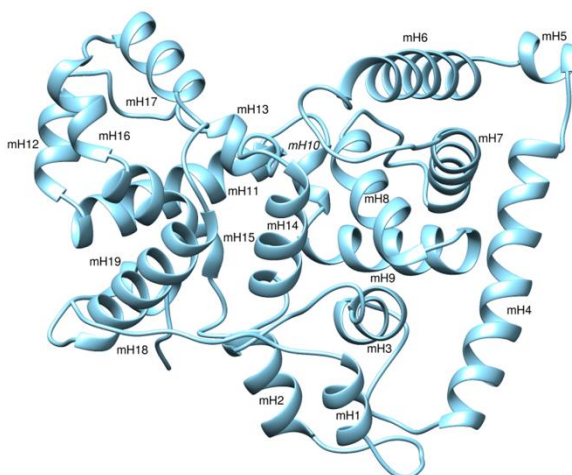


Fig. 1. Structure of the TBC domain of murine TBC1D17 protein.

Recently, we have analyzed the structure of the Rab1b and TBC1D20 complex, and based on that, the set of helical peptides was designed and synthesized. We have screened their biological activity *in vitro* and identified leading molecules that will be introduced into experiments on mammalian cells. Moreover, we have crystallized and solved the structure of murine and human TBC1D17 proteins and designed molecules targeting their interaction with Rab5a protein, by homology to known structures. We have also performed a functional analysis of this GAP protein and revealed the importance of

A-3

the Rab-binding domain (RBD) in mediating Rab5a-TBC1D17 interactions [3]. It is worth noting that this feature was omitted in previous research on this protein [4]. This discovery gives the new opportunity for designing and synthesis of molecules targeting Rab5a-TBC1D17 interaction.

Acknowledgement

Research is part of the Preludium Bis-3 projects (2021/43/O/NZ1/01565 and 2021/43/O/ST4/01628) financed by National Science Centre, Poland. This work was completed when the authors DN and DR were Doctoral Candidates in the Interdisciplinary Doctoral School at the Lodz University of Technology, Poland.

Literature

- [1] N. A. Guadagno, C. Progidia, *Cells*, **8**(8) (2019) 909.
- [2] J. L. Gray, F. von Delft, P. E. Brennan, *Angew Chem Int Ed Engl*, **59**(16) (2020) 6342–6366.
- [3] D. Nielipińska, M. Orlikowska, M. Nielipiński, et al., *Protein Sci.*, **35**(5) (2026) e70581.
- [4] X. S. Rao, X. X. Cong, X. K. Gao, et al., *Cell Death Differ.*, **28**(12) (2021) 3214–3234.

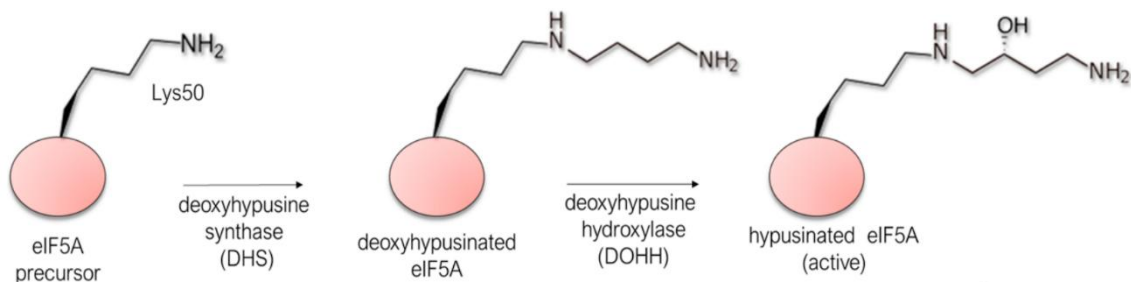
UDOKŁADNIANIE I ANALIZA STRUKTURALNA CZYNNIKA TRANSLACYJNEGO EIF5A-1 Z *ARABIDOPSIS THALIANA*

Igor Naporowski, Bartosz Sekuła, Agnieszka Pietrzyk-Brzezińska

*Politechnika Łódzka, Wydział Biotechnologii i Nauk o Żywności,
Instytut Biotechnologii Molekularnej i Przemysłowej*

Czynnik translacyjny eIF5A należy do wysoce konserwowanych ewolucyjnie białek występujących u organizmów eukariotycznych i archeonów. Chociaż historycznie został sklasyfikowany jako czynnik inicjacji translacji, obecnie wiadomo, że jego zasadnicza rola dotyczy przede wszystkim elongacji translacji oraz wspomaganie syntezy niektórych fragmentów polipeptydowych, w tym fragmentów bogatych w reszty prolinowe [1,2]. eIF5A uczestniczy również w regulacji wielu procesów komórkowych, takich jak proliferacja, adaptacja metaboliczna, odpowiedź na stres oraz rozwój organizmów eukariotycznych [3,4].

Wyjątkową cechą eIF5A jest obecność hypuzyny — nietypowego aminokwasu powstającego w wyniku unikatowej modyfikacji potranslacyjnej konserwowanej reszty lizyny. Hypuzynacja przebiega dwuetapowo: syntaza deoksyhypuzyny (DHS) przenosi grupę aminobutyłową spermidyny na resztę lizyny prekursora eIF5A, tworząc deoksyhypuzynę, która następnie jest hydroksylowana przez hydroksylazę deoksyhypuzyny (DHPH) [4,5]. Modyfikacja ta jest niezbędna do pełnej aktywności biologicznej eIF5A, jednak strukturalne podstawy działania roślinnych homologów tego białka oraz wpływ hypuzynacji na ich właściwości pozostają nadal niewystarczająco poznane.



Rys. 1. Schematyczne przedstawienie szlaku hypuzynacji. Źródło: [1].

Celem badań była analiza strukturalna białek związanych ze szlakiem hypuzynacji u *Arabidopsis thaliana*, ze szczególnym uwzględnieniem czynnika eIF5A-1. W ramach pierwszego etapu przeprowadzono nadprodukcję i oczyszczanie rekombinowanych białek DHS, DHPH oraz eIF5A-1 w bakteryjnym systemie ekspresyjnym *Escherichia coli*. Oczyszczone preparaty wykorzystano do prób krystalizacji z użyciem komercyjnych zestawów screeningowych. Uzyskano kryształy białka eIF5A-1. Model strukturalny eIF5A-1 udokładniano i zwalidowano. Dodatkowo wykonano analizy porównawcze homologów strukturalnych, przyrównanie sekwencji aminokwasowych oraz ocenę konserwatywności regionów funkcjonalnych.

A-4

Otrzymane rezultaty stanowią podstawę do dalszych badań nad zależnością między strukturą, hypuzynacją i funkcją eIF5A-1 u roślin.

Literatura

- [1] T. E. Dever, E. Gutierrez, B. S. Shin, The hypusine-containing translation factor eIF5A. *Crit Rev Biochem Mol Biol.*, **49**(5) (2014) 413–25. DOI: 10.3109/10409238.2014.939608
- [2] A. P. Schuller, C. C. C. Wu, T. E. Dever, A. R. Buskirk, R. Green, eIF5A Functions Globally in Translation Elongation and Termination. *Mol. Cell*, **66**(2) (2017) 194–205.e5. DOI: 10.1016/j.molcel.2017.03.003
- [3] P. Pálfi, L. Bakacsy, H. Kovács, Á. Szepesi, Hypusination, a Metabolic Posttranslational Modification of eIF5a in Plants During Development and Environmental Stress Responses. *Plants*, **10**(7) (2021) 1261. DOI: 10.3390/plants10071261
- [4] S. Nakanishi, J. L. Cleveland, The Many Faces of Hypusinated eIF5A: Cell Context-Specific Effects of the Hypusine Circuit and Implications for Human Health. *International Journal of Molecular Sciences*, **25**(15) (2024) 8171. DOI: 10.3390/ijms25158171
- [5] M. H. Park, E. C. Wolff, Hypusine, a polyamine-derived amino acid critical for eukaryotic translation. *J Biol Chem.*, **293**(48) (2018) 18710–18718. DOI: 10.1074/jbc.TM118.003341
- [6] E. Wątor, P. Wilk, P. Grudnik, Half Way to Hypusine—Structural Basis for Substrate Recognition by Human Deoxyhypusine Synthase. *Biomolecules*, **10**(4) (2020) 522. DOI: 10.3390/biom10040522

CRYSTAL STRUCTURE OF HAEMOGLOBIN FROM ATLANTIC SALMON

Zuzanna Kurek¹, Ela Sulkifli^{1,2}, Anna Bujacz¹, Grzegorz Bujacz¹

¹ *Institute of Molecular and Industrial Biotechnology, Faculty of Biotechnology and Food Sciences, Lodz University of Technology, ul. B. Stefanowskiego 2/22, 90-537 Łódź*

² *Agricultural Science, Hasanuddin University, Jl. Perintis Kemerdekaan No.10, Tamalanrea Indah, Kec. Tamalanrea, Kota Makassar, Sulawesi Selatan 90245, Indonesia*

Haemoglobin is one of the main vertebrate blood proteins and is responsible for transporting oxygen, which is essential for most living organisms. Changes in its structure are directly linked to evolutionary processes that enabled adaptation to diverse environments, including aquatic and terrestrial habitats as well as extreme temperatures [1]. Current research on haemoglobin focuses mainly on mammals, while data on other vertebrate classes remain scarce.

Haemoglobin consists of two α and two β subunits creating a tetramer structure. In fish, we can usually find several isoforms of haemoglobin subunits. This diversity is generally associated with changing environmental conditions experienced during the fish life cycle [2]. The teleosts are a diverse group of fish that include the Salmonidae family. This group was shown to exhibit multiple haemoglobin gene isoforms [1]. During the genomic studies of the Atlantic salmon (*Salmo salar*) over six distinct genes were found for each of the haemoglobin subunits [3]. Additionally, in the UniProt database over 20 protein sequences were deposited for each of the haemoglobin subunits with percent identity varying from 50 to 99%, which further confirms the diversity of these proteins [4].

The conducted research focused on isolation and crystallization of haemoglobin from the blood of Atlantic salmon. We managed to obtain good quality crystals and perform initial measurements using a laboratory diffractometer SuperNova. The crystals are also intended to be measured on a synchrotron. The structure solved based on the initial measurements (2.8 Å) can then act as a model for molecular replacement after obtaining higher quality diffraction data.

Atlantic salmon is one of the most commonly consumed fish in Europe. Salmon farming generates substantial waste, including iron-rich blood. Since iron deficiency is among the most widespread health problems, studies on salmon blood may contribute to development of an easily bioavailable supplement to help treat anaemia while supporting circular-economy approaches through the utilization of fish-processing by-products.

Literature

- [1] T. Desvignes, I. Bista, K. Herrera, A. Landes, J. H. Postlethwait, *Mol. Biol. Evol.*, **40**(11) (2023) msad236.
- [2] I. M. Kamshilov, *Inland Water Biology*, **15**(5) (2022) 701–705.
- [3] N. L. Quinn, K. A. Boroevich, K. P. Lubieniecki, W. Chow, E. A. Davidson, R. B. Phillips, B. F. Koop, W. S. Davidson, *BMC Genomic*, **11**(1) (2010) 539.
- [4] F. Madeira, N. Madhusoodanan, J. Lee, A. Eusebi, A. Niewielska, A.R.N. Tivey, R. Lopez, S. Butcher, *Nucleic acids research*, **52**(W1) (2024) W521–W525.

A-6

STRUCTURAL STUDIES OF S-ADENOSYLMETHIONINE DECARBOXYLASE FROM THE ENDOPHYTIC STRAIN *BACILLUS THURINGIENSIS* GS1

Patryk Kowalski, Olga Marchut-Mikołajczyk, Natalia Rutkowska, Bartosz Sekuła

Institute of Molecular and Industrial Biotechnology, Faculty of Biotechnology and Food Sciences, Lodz University of Technology, Stefanowskiego 2/22, 90-537

Progressive climate change and crop diseases are among the greatest challenges facing modern agriculture. Plants are exposed to stressors such as high temperature, salinity or phytopathogens, which negatively affect crop quality and yield [1]. Natural methods that enhance plants' stress response and promote their growth without negatively impacting the environment are sought. Promising research area may represent endophytic bacteria from *Bacillus* genus, whose ability to synthesize polyamines helps increase resistance to stress factors [2].

S-Adenosylmethionine decarboxylase (SAMDC) participates in polyamine biosynthesis providing a cofactor in a form suitable for polyamine synthases. SAMDC is synthesized in an inactive form as a proenzyme. It is activated by internal autoproteolysis, forming two subunits (α and β) and pyruvate prosthetic group [3]. Currently, no structure of SAMDC from bacteria belonging to *Bacillus* genus has been deposited in Protein Data Bank.

Genome of the endophytic bacteria *Bacillus thuringiensis* GS1 was screened for the presence of genes that encode SAMDC, the identified gene was isolated and then cloned into an expression vector to produce recombinant protein in *E. coli*. The resulting protein was subjected to a multi-step purification process, which effectiveness was confirmed by electrophoretic analysis. The purified protein was concentrated and then crystallized. Protein crystals were subjected to X-ray diffraction experiment, and obtained data were used to determine preliminary three-dimensional SAMDC structure.

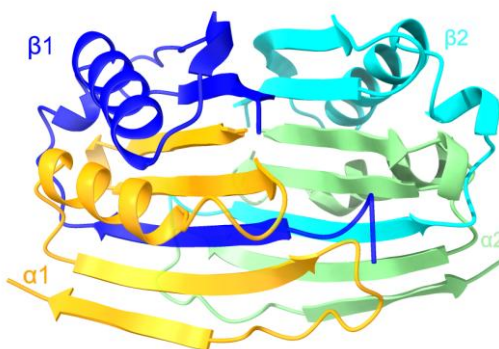


Fig. 1. Biological assembly of BtSAMDC.

This research was funded by National Science Centre, Poland grant Sonata-Bis-15 2025/58/E/NZ8/00097.

Literature

- [1] S. Chakraborty, A. C. Newton, *Plant Pathol.*, **60**(1) (2011) 2–14.
- [2] A. R. Khan et al., *Biology*, **11**(12) (2022) 1763.
- [3] A. E. Pegg et al., *Biochem Soc Trans.*, **26**(4) (1998) 580–586.

ON THE SOLUBILITY OF Mg²⁺ AND Si⁴⁺ IONS IN YAG

Ihor Vorona¹, Anton Balabanov¹, Arsenii Tymoshenko¹, Vyacheslav Baumer²,
Oksana Matvienko¹, Serhii Parkhomenko¹, Dmitrii Fil¹, Mark Vovsianiker¹,
Roman Yavetskiy¹

¹ *Institute for Single Crystals of NAS of Ukraine, 60 Nauky Ave., 61072 Kharkiv, Ukraine*

² *STC „Institute for Single Crystals” of NAS of Ukraine, 60 Nauky Ave., 61072 Kharkiv, Ukraine*

Fabrication of RE-doped YAG transparent ceramics by reactive sintering requires sintering additives in order to increase the diffusion mobility of constituent ions during the high-temperature sintering stage. Typically, heterovalent cations are used as the sintering aids. They create point defects in YAG crystalline structure and change the equilibrium concentration of defects by orders of magnitude, even if the tiny doping concentration is utilized. Most common sintering aids for YAG are Si⁴⁺ ions, Mg²⁺ ions or their combination Si⁴⁺+Mg²⁺. However, the knowledge on solubility limits of these ions in the crystalline structure of YAG is limited and often contradictory. This is mainly due to different starting materials used, variation of processing conditions of ceramics, etc. In this work, we focus mainly on the solubility of Mg²⁺ in the YAG matrix and its comparison with literature data for Si⁴⁺, as well as for Si⁴⁺+Mg²⁺ cations.

YAG transparent ceramics doped with different concentrations of Mg²⁺ or Si⁴⁺+Mg²⁺ were prepared by the reactive sintering method using high-purity starting oxides. The lattice parameter of YAG was studied by the XRD method. The main types of point defects and their effect on the lattice parameter in YAG:Mg²⁺ have been identified based on the results of DFT calculations. The experimental data of lattice parameters of YAG:Mg²⁺ ceramics were compared with the calculated ones in order to identify the most thermodynamically favorable defects.

The processes of synthesis, structural–phase state, and optical properties of YAG ceramics doped with MgO sintering aid (0–0.15 wt.%), have been studied. It was determined that magnesium ions activate diffusion mass transfer due to the reduction of grain boundary mobility and the formation of complex defects. The optical homogeneity of YAG ceramics is achieved under MgO doping in the concentration range of 0.03–0.06 wt.%. It was shown that exceeding this concentration leads to the formation of secondary magnesium–aluminum spinel phases in the ceramics, resulting in the degradation of their optical properties.

The mechanisms of magnesium ion incorporation into the structure of yttrium–aluminum garnet have been identified, and the solubility limits of Mg²⁺ in transparent YAG:Mg²⁺ ceramics have been clarified. It was established that doping with magnesium ions in the concentration range of 0–0.06 wt.% leads to a linear increase in the lattice parameter of YAG. Further increase in concentration is accompanied by a stepwise decrease in the lattice parameter due to the formation of secondary magnesium-rich phases. The solubility limit of magnesium ions in the garnet structure is found to be within the concentration range of 0.06–0.10 wt.% MgO. Theoretical calculations and XRD data indicate that Mg²⁺ ions are incorporated into the YAG structure by substituting Al³⁺

A-7

cationic positions, with the formation of oxygen vacancies compensating for the excess charge.

It was shown that co-doping of YAG ceramics with Si^{4+} , Mg^{2+} ions significantly increases their solubility limit. There is a linear dependence of the lattice parameter on the concentration of Mg^{2+} at least up to 0.12 wt.% (and most likely to higher concentrations). This confirms the prediction [1] that co-doping by Si^{4+} and Mg^{2+} ions could decrease the solid-solution formation energy in YAG lattice. Thus, utilization of $\text{Si}^{4+}+\text{Mg}^{2+}$ complex sintering aid expands significantly the useful concentration range of additives while retaining essential for laser ceramics single-phase state.

Acknowledgements

This study was supported by the National Research Foundation of Ukraine within the Project No. 2025.07/0138.

Literature

[1] S. Jiang, T. Lu, J. Chen, *Comput. Mater. Sci.*, **69** (2013) 261.

STRUKTURALNE BADANIA WYBRANYCH MATERIAŁÓW WĘGLI KAMIENNYCH I ICH POPIOŁÓW Z WYKORZYSTANIEM METODY DYFRAKCJI PROMIENIOWANIA RENTGENOWSKIEGO XRD

Dawid Wachnicki*, Ewelina Ksepko**

*Katedra Inżynierii i Technologii Procesów Chemicznych, Wydział Chemiczny,
Politechnika Wroclawska, ul. Wybrzeże Stanisława Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław*

**e-mail: 279108@student.pwr.edu.pl, **e-mail: ewelina.ksepko@pwr.edu.pl*

Węgiel jest jednym z największych źródeł energii nieodnawialnej w Polsce i na świecie. W procesach spalania węgla powstają duże ilości popiołu, zatem istotne jest ich wykorzystanie. Materiał ten jest często wykorzystywany w budownictwie jako wypełniacz pod budowę dróg i budynków, lub jako materiał wiążący. Zaznajomienie się ze składem fazowym popiołów z węgla, jak i samych węgla przed spopieleniem, pozwala na ich ponowne wykorzystanie w różnych dziedzinach przemysłu. Większość węgla bogatych w krzemionkę może posłużyć do produkcji szła, ceramiki i materiałów budowlanych, z kolei tlenki żelaza, w przemyśle metalurgicznym, czy też do produkcji pigmentów i farb. Niektóre popioły o mogą być wykorzystane jako cenne źródło pozyskania pierwiastków ziem rzadkich (REE) lub germanu, tytanu czy srebra.

W pracy przedstawiono wyniki analizy dyfrakcyjnej XRD z użyciem Rigaku MiniFlex600 wybranych węgla kamiennych i brunatnych. Celem pracy była identyfikacja składu fazowego próbek oraz przedstawienie możliwych zastosowań ich popiołów jako surowca wtórnego. Analizę fazową (jakościową i ilościową) otrzymanych dyfraktogramów przeprowadzono, wykorzystując oprogramowanie SmartLab Studio II firmy Rigaku.

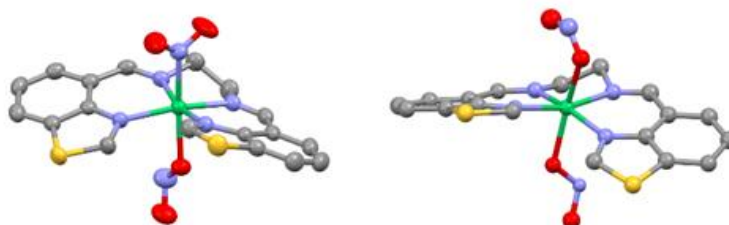
BADANIE WŁAŚCIWOŚCI FOTOPRZELĄCZALNYCH NITROWEGO ZWIĄZKU KOORDYNACYJNEGO NIKLU

Szymon Suchecki, Kacper Paszczyk, Katarzyna Jarzemska, Kinga Potempa

Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa

Materiały fotoprzelączalne stanowią przedmiot zainteresowania nowoczesnych nauk materiałowych. Wśród potencjalnych zastosowań takich materiałów wyróżnia się katalizatory, sensory lub nośniki pamięci. Istotą ich działania jest „przełączenie” pod wpływem światła, wiążące się chociażby ze zmianą struktury na poziomie molekularnym, w wyniku czego zmieniają się pewne właściwości materiału.

Celem projektu było zbadanie zdolności fotoprzelączalnych kompleksu niklu (dalej nazywanego Ni-f) przy pomocy rentgenografii strukturalnej. W stanie podstawowym brunatnoczerwony Ni-f krystalizuje w grupie przestrzennej $P\bar{1}$, atom niklu w nim jest skoordynowany oktaedrycznie przez czterokleszczowy, płaski, organiczny ligand oraz dwie grupy NO_2 , z czego jedna występuje jako izomer nitro a druga jako izomer egzo-nitrito. Wybrano dobrej jakości monokryształ badanego związku i przeprowadzono pomiary dyfraktometryczne w temperaturze 100 K przed naświetlaniem (utrzymując kryształ w zupełnej ciemności) oraz po 30 minutach naświetlania światłem niebieskim o maksimum natężenia przy długości fali równej 470 nm [1].



Rys. 1. Struktura nieprzełączonego kompleksu Ni-f (po lewej) oraz forma przełączona (po prawej).

Zgodnie z oczekiwaniem, po rozwiązaniu struktury zauważono przełączenie tylko jednej z grup NO_2 związku z konformacji nitro na konformację endo-nitrito. Stopień maksymalnej konwersji określono jako 80%. Przeprowadzono także pomiary w różnych temperaturach i ustalono nikłą trwałość izomeru endo-nitrito powyżej 120 K. Związek scharakteryzowano również za pomocą spektroskopii IR i wykonano pomiary absorpcji kryształu w zależności od temperatury.

Serdeczne podziękowania dla grantu SONATA BIS (2020/38/E/ST4/00400) za wsparcie finansowe, a także dla mądrych i wspiających ludzi, którzy swoją pracą przyczynili się do tych badań.

Literatura

- [1] R. Kamiński et al., A portable light-delivery device for in situ photocrystallographic experiments in the home laboratory. *Journal of Applied Crystallography* **49**(4) (2016) 1383–1387. DOI: 10.1107/S1600576716008128

FROM SYNTHESIS TO STRUCTURAL RESPONSE: AMU4 A NEW NICKEL(II)-MOF

Natalia Sacharczuk, Szymon Sobczak

*Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Uniwersytetu Poznańskiego 8,
Poznań, 61-614, Poland*

Metal-organic frameworks and related coordination materials attract considerable attention due to their porosity, structural diversity, and tunable architectures, a significance recently highlighted by the 2025 Nobel Prize in Chemistry [1]. Temperature and pressure can affect their crystal packing, coordination geometry, and pore dimensions, making them suitable systems for studying framework flexibility under non-ambient conditions [2,3].

In this work, we present the synthesis and structural characterization of a new nickel(II)-based permanently porous material, denoted as AMU4 [4-6]. Single crystals of AMU4 were grown by a slow-diffusion technique, in which solutions of the starting materials of different densities are carefully layered in a test tube. The crystallization process is moderated by an intermediate solvent layer, allowing a slow interdiffusion of the reagents and gradual formation of single crystals suitable for structural analysis.

The crystal structure of AMU4 was first determined under ambient conditions. Subsequently, low-temperature and high-pressure single-crystal X-ray diffraction experiments were performed to investigate the stability and flexibility of the framework, with particular attention to changes in pore dimensions. To further characterize the structural modifications in AMU4, high-pressure Raman spectroscopy was additionally employed. The combined diffraction and spectroscopic investigations of AMU4 under non-ambient conditions provide a basis for evaluating the flexibility of this material, contributing to the development of novel porous materials with improved stability at highly strained environments.

Literature

- [1] Nobel Prize Outreach AB, *Press release: The Nobel Prize in Chemistry 2025*, NobelPrize.org, 2025. Available at: <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2025/press-release/> (accessed 18 May 2026).
- [2] S. McKellar, S. Moggach, *Acta Crystallogr. Sect. B*, **71** (2015) 587–607.
- [3] A. Goodwin, I. Collings, *J. Appl. Phys.*, **126** (2019).
- [4] M. Andrzejewski, A. Katrusiak, *J. Phys. Chem. Lett.*, **8** (2017) 279–284.
- [5] S. Sobczak, A. Katrusiak, *Cryst. Growth Des.*, **18** (2018) 1082–1089.
- [6] A. Półrolniczak, A. Katrusiak, *Mater. Adv.*, **2** (2021) 4677–4684.

TEMPERATURE EFFECT ON NDI AND PDI DERIVATIVES STRUCTURE

Gracjan Russ, Szymon Sobczak

*Adam Mickiewicz University, Chemistry Faculty, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8,
61-614, Poznań*

Naphthalenediimide (NDI) and perylenediimide (PDI) derivatives belong to an important class of organic semiconductors whose optoelectronic properties are strongly governed by molecular aggregation and the formation of characteristic one-dimensional π -stacks. NDI- and PDI-based systems are prominent electron-accepting organic semiconductors, in contrast to the more common electron-donating organic materials. Their high chemical and thermal stability, together with the possibility of structural modification through imide substitution, makes them promising alternatives to inorganic materials used in photovoltaic devices [1], light-emitting diodes [2], flexible batteries [3], and other optoelectronic applications.

Presently, we selected homologs 2,7-diethylbenzo[*lmn*][3,8]phenanthroline-1,3,6,8(2H,7H)-tetraone and 2,9-Diethylanthra[2,1,9-*def*:6,5,10-*d'e'f'*]diisoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone hereafter referred to as di-EtNDI and di-EtPDI, respectively. The molecular structures are shown in Figure 1.

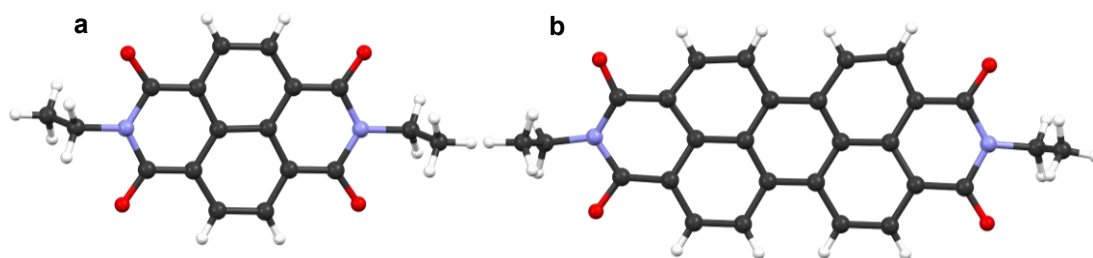


Fig. 1. Presenting molecules of di-EtNDI (a) and di-EtPDI (b).

Single crystals of di-EtNDI suitable for single-crystal X-ray diffraction experiments were selected from the as-received sample and used without further recrystallization. Under ambient conditions, di-EtNDI crystallizes in the monoclinic space group $P2_1/c$. For di-EtPDI, crystals of diffraction quality were obtained by recrystallization from pyridine. The resulting structure belongs to the orthorhombic crystal system, space group $Pca2_1$. These preliminary results provide the basis for further investigations of temperature- and pressure-dependent structure–property relationships [4].

Literature

- [1] F. C. Krebs, N. Espinosa, M. Hose, R. Sondergaard, M. Jorgensen, *Adv. Mater.*, **26** (2014) 29–39.
- [2] J. W. Park, D. C. Shin, S. H. Park, *Semicond. Sci. Technol.*, **26** (2011) 034002.
- [3] A. Doraiswamy, C. Jin, R. J. Narayan, P. Mageswaran, P. Mente, R. Modi, R. Auyeung, D. B. Chrisey, A. Ovsianikov, B. Chichkov, *Acta Biomater.*, **2** (2006) 267–275.
- [4] P. Ratajczyk, S. Sobczak, M. Andrzejewski, P. Woźny, F. Mrin, L. Maini, A. Katrusiak, *J. Mater. Chem. C*, **13** (2025) 13509–13518.

SYNTHESIS, STRUCTURAL CHARACTERIZATION, AND LUMINESCENCE PROPERTIES OF NOVEL LANGBEINITE-TYPE PHOSPHATES

**Nadiia Rebrova¹, Alexander Grippa², Pedro Berastegui³, Damian Szymański¹,
Maciej Ptak¹, Przemysław J. Dereń¹**

¹ *Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Science,
Okólna 2, 50-422 Wrocław, Poland*

² *Institute for Scintillation Materials, National Academy of Sciences of Ukraine, Nauki
Avenue, 60, 61001, Kharkiv, Ukraine*

³ *Department of Chemistry-Ångström Laboratory, Uppsala University, Box 538, S-751
21 Uppsala, Sweden*

Langbeinite-type structures represent a versatile crystallographic framework that is particularly well suited for the systematic design and synthesis of new compounds. Phosphates adopting the langbeinite structure are of particular interest, as they form a broad family of materials incorporating A^+ and B^{n+} cations. These compounds can be described by general formulas such as $A^+B^{4+}_2(PO_4)_3$, $A^+_2B^{3+}B^{4+}(PO_4)_3$, $B^{2+}_{1.5}B^{3+}_2(PO_4)_3$, and $A^+B^{2+}B^{3+}_2(PO_4)_3$ [1,2]. This compositional flexibility enables extensive cation substitution, making these structures highly attractive for the development of new functional materials with tunable physicochemical properties.

Within this family, we report the new compound $RbSrSc_2(PO_4)_3$, whose existence was predicted based on crystallochemical considerations and successfully realized via solid-state synthesis. The phase purity and crystal structure of the obtained material were investigated by X-ray powder diffraction, and its langbeinite-type structure was confirmed by Rietveld refinement.

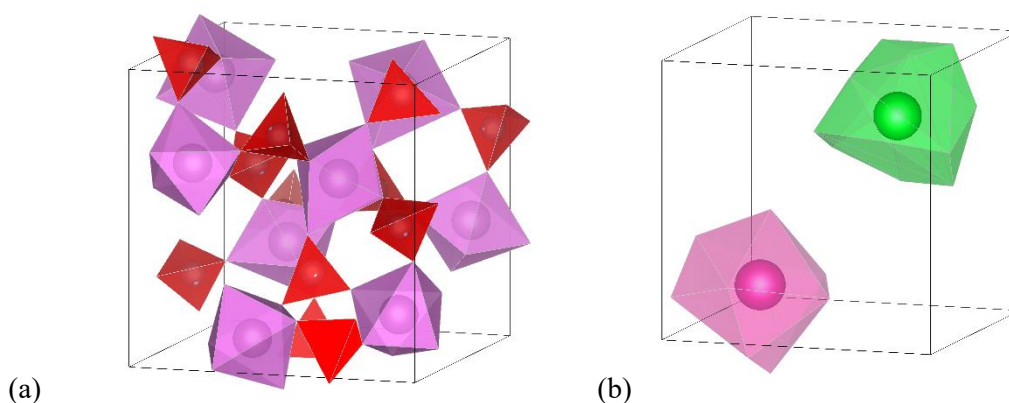


Fig. 1. (a) Framework of $[ScO_6]$ octahedra (pink) and $[PO_4]$ tetrahedra (red); (b) examples of polyhedra around the 9-coordinated M(2) (pink) and 12-coordinated M(1) (green) sites in the unit cell.

A three-dimensional crystal structure of $RbSrSc_2(PO_4)_3$ is formed by units consisting of corner-sharing two $[ScO_6]$ octahedra and three $[PO_4]$ tetrahedra along the threefold rotation axes, Figure 1a. The cavities in this framework are occupied by the larger $[Sr,Rb]$ ions in distorted polyhedra with 9- and 12-coordination for M(2) and M(1) respectively, Figure 1b.

A-12

Additionally, the physicochemical and optical properties of Pr³⁺-doped RbSrSc₂(PO₄)₃ will be presented. These investigations will include absorption spectroscopy, luminescence measurements, morphological analysis using scanning electron microscopy, and thermal stability evaluation by differential scanning calorimetry. The potential applications of this new phosphor will also be discussed.

Acknowledgment

The authors gratefully acknowledge financial support from the National Science Centre under Grants No. UMO-2021/41/B/ST5/03792 and UMO-2025/57/B/ST4/00594.

Literature

- [1] J. Carvajal, A. Aznar, R. Solé, J. Gavalda. *Chem.Mater.*, **15** (1) (2003) 204–211.
- [2] D. Balaji, T. Mandlimath, J. Chen, Y. Matsushita, S. P. Kumar, *Inorg. Chem.*, **59**(18) (2020) 13245–13253.

MICROSTRAIN IN MIL-88B(V)

Jolanta Darul, Marta Piechocka, Paweł Piszora

*Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Uniwersytetu Poznańskiego 8,
Poznań, Poland*

Composed of metal ions or their clusters linked by organic ligands, MOFs are characterized by a unique combination of high surface area, tunable pore size, and structural diversity, making them ideal candidates for various applications such as gas storage, separation, catalysis, and drug delivery [1,2]. The characteristics and quality of MOFs depend on the framework structure and various synthesis techniques. MIL-88B(V) can "breathe" and immersion of the material in various solvents causes its structure to expand. The lattice parameters vary depending on the synthesis method, and the product synthesis diagrams for vanadium MOFs contain both single- and multiphase regions [3].

The structure of MIL-88B may depend on the chosen synthesis method and is further altered by the rapid evaporation of free solvents in an air atmosphere. Changing the solvent amount affects the values of the crystal lattice parameters but also causes changes in microstrain. Until now, the crystal lattice strain parameters have only been considered in refining the MIL-88B structure [3], but the spatial distribution of microstrain, which is important for applications, remained unknown.

628 mg of VCl_3 and 664 mg of terephthalic acid were placed in a Teflon reaction vessel, and then 4 ml of hydrochloric acid (1 M) and 20 ml of ethanol were added. The mixture was stirred for 30 minutes, and then the suspension was subjected to ultrasonication for 15 minutes. After this time, the Teflon vessel was placed in an autoclave and heated at 120°C for 48 hours.

To gain insight into the microstructure of the multiphase sample, we used profile intensity partitioning, specifically the Le Bail technique, which works particularly well in the case of overlapping intensities because in this method the intensity is assigned based on the multiple intensities contributing to a specific peak. We modeled the anisotropic strain broadening of X-ray reflections using the method described by Stephens [4].

The microstrain broadening anisotropy can reveal anisotropy of internal solid properties that might otherwise be difficult to characterize. Our results pave the way for the discovery of new, responsive MOFs exhibiting more complex phase transition behavior.

Literature

- [1] M. S. Mohtaram, A. Abolghasemi, S. Sayahi, H. Rajabi, S. Mohtaram, M. Long, S. Sabbaghi, *Coord. Chem. Rev.*, **546** (2026) 217083.
- [2] S. Ullah, A. U. Rehman, L. Gurbanova, T. Najam, A. M. Al-Mohaimed, W. A. Al-Onazi, M. A. Nazir, *Int. J. Environ. Anal. Chem.*, **106**(2) (2026) 444–462.
- [3] F. Carson, J. Su, A. E. Platero-Prats, W. Wan, Y. Yun, L. Samain, X. Zou, *Cryst. Growth Des.*, **13**(11) (2013) 5036-5044.
- [4] P. W. Stephens, *J. Appl. Crystallogr.*, **32** (1999) 281–289.

STRUCTURAL DIVERSITY OF LAYERED HYBRID LEAD HALIDES WITH TWO DISTINCT ORGANIC CATIONS

**Dawid Drozdowski¹, Adam Kabański¹, Katarzyna Fedoruk-Piskorska²,
Oleksandr Korolevych¹, Anna Gaĝor¹**

¹ *Institute of Low Temperature and Structure Research Polish Academy of Sciences,
Okólna 2, 50-422 Wrocław*

² *Wrocław University of Science and Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27,
50-370 Wrocław, Poland*

Three-dimensional hybrid organic-inorganic lead halides (HLHs) have attracted attention owing to their exceptional optoelectronic properties and broad application potential in photovoltaics, light-emitting devices, etc. However, their practical use is constrained by poor environmental and moisture stability, motivating interest in lower-dimensional analogues, such as two-dimensional (2D, layered) systems [1,2]. Composed of inorganic $[\text{PbX}_6]^{4-}$ octahedral slabs separated by organic spacer cations, layered HLHs act as natural quantum wells with enhanced exciton binding energies and photoluminescence (PL) quantum yields versus the 3D analogs. PL properties in these materials are primarily governed by the dimensionality and connectivity of the inorganic framework, as well as by the geometry and hydrogen-bonding capacity of the organic cations [3,4].

Beyond classical layered perovskites, low-dimensional HLHs display remarkable structural diversity stemming from varied $[\text{PbX}_6]^{4-}$ connectivity, e.g., $[\text{Pb}_3\text{X}_8]^{2-}$, $[\text{Pb}_3\text{X}_{12}]^{6-}$ and $[\text{Pb}_6\text{X}_{22}]^{10-}$, yielding numerous 2D inorganic motifs [5]. Compounds incorporating two distinct monovalent cations have recently emerged as promising broadband emitters, since co-templating allows further tuning of framework topology and excitonic response [6].

We present examples of new hybrid lead bromides incorporating two distinct organic cations within the crystal structure (Figure 1). The first two compounds, $(\text{IM})_2(\text{EA})\text{Pb}_3\text{Br}_9$ and $(\text{PY})_2(\text{EA})\text{Pb}_3\text{Br}_9$ (IM = imidazolium, PY = pyrazolium, EA = ethylammonium), adopt a previously unreported 2D $[\text{Pb}_3\text{Br}_9]^{3-}$ framework of edge-sharing octahedral ribbons interconnected by bridging octahedra. Both exhibit excitation- and temperature-dependent dual PL, enabling continuous color tuning from red orange at 80 K to white or near-white emission at room temperature. The third compound, $(\text{PY})(\text{FA})\text{PbBr}_4$ (FA = formamidinium), features (110)-oriented inorganic layers and undergoes an order-disorder phase transition, while retaining room-temperature luminescence. Together, these systems demonstrate how cation composition and framework topology can be leveraged to engineer optical behavior across a wide temperature range.

This research was funded by the Polish National Science Centre (project No. 2023/49/N/ST5/00521).

A-14

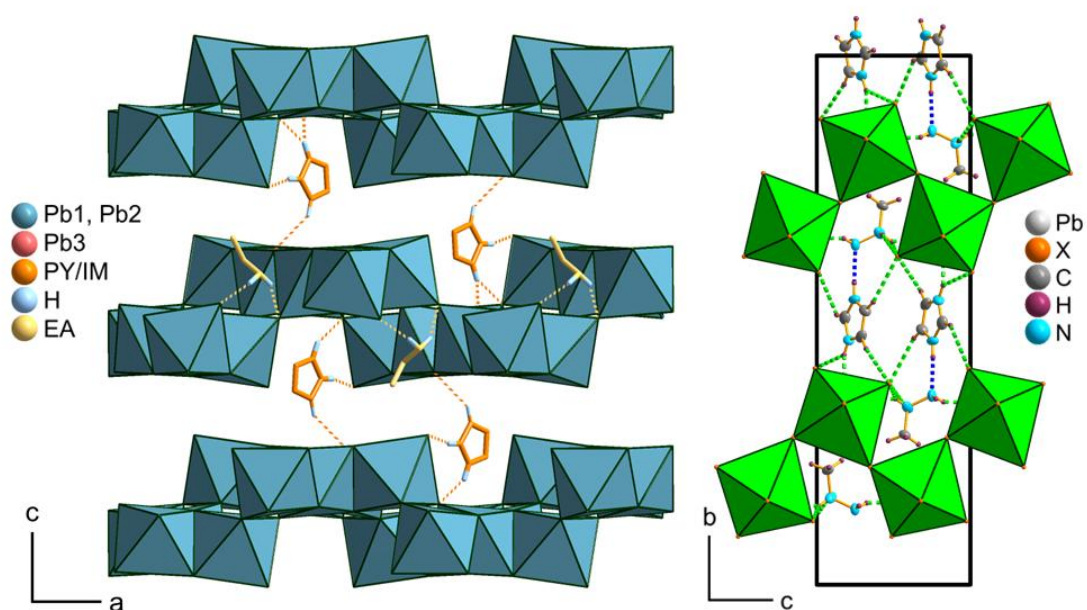


Fig. 1. Examples of layered hybrid lead bromides featuring two distinct organic cations within the crystal structure.

Literature

- [1] T.-H. Han, K. Y. Jang, Y. Dong, et al., *Nat. Rev. Mater.*, **7** (2020) 757.
- [2] B. Kang, F. Yan, *Energy Environ. Sci.*, **18** (2025) 3917.
- [3] K. Wang, J. Y. Park, Akriti, L. Dou, *EcoMat*, **3** (2021) e12104.
- [4] M. D. Smith, B. A. Connor, H. I. Karunadasa, *Chem. Rev.*, **119** (2019) 3104.
- [5] J. Fu, T. Bian, J. Yin, M. Feng, Q. Xu, Y. Wang, T. C. Sum, *Nat. Commun.*, **15** (2024) 4562.
- [6] D. Drozdowski, K. Fedoruk, A. Kabański, M. Maczka, A. Sieradzki, A. Gagor, *J. Mater. Chem. C*, **11** (2023) 4907.

MORPHOLINIUM-BASED Bi³⁺/Sb³⁺ IODIDES WITH REVERSIBLE THERMOCHROMISM

**Tamara J. Bednarchuk, Magdalena N. Rowińska, Oleksandr Korolevych,
Anna Gaĝor**

*Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences,
Okólna 2, 50-422 Wrocław*

Organic–inorganic halometallates represent a versatile class of hybrid compounds in which metal-halide units combine with organic cations, giving rise to diverse structural motifs governed by metal coordination preferences, hydrogen bonding, and cation geometry. Within this family, bismuth(III) and antimony(III) have emerged as particularly promising metal centres, owing to their stereochemically active lone pairs and pronounced spin-orbit coupling effects, which strongly influence octahedral distortion and electronic structure. Building on our recent work in [1-3], we have continued to explore hybrid halometallates incorporating Bi³⁺/Sb³⁺ in combination with diverse organic amines.

Herein, we describe the synthesis, crystal structures, intermolecular interactions, electronic structure, thermochromic behaviour, and optical properties of two new isostructural compounds, (MOR)₂(H₅O₂)BiI₆ (**1**) and (MOR)₂(H₅O₂)SbI₆ (**2**). This work highlights the interplay between composition, hydrogen bonding, and structural dimensionality in directing the structural and optoelectronic properties of hybrid iodometallates.

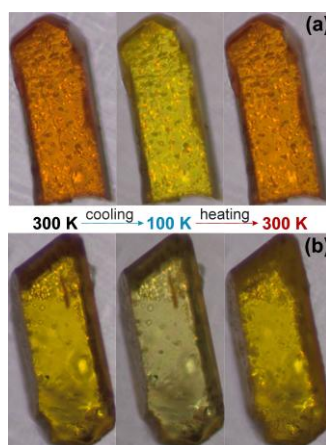


Fig. 1. Photographs showing the reversible thermochromic behaviour of compounds **1** (a) and **2** (b) upon cooling from 300 K to 100 K and subsequent heating back to 300 K.

The research was funded by the National Science Centre as part of the OPUS 22 project (grant number: 2021/43/B/ST5/01172).

Literature

- [1] M. N. Rowińska, O. Korolevych, A. Kabański, D. Stefańska, T. Bednarchuk, A. Piecha-Bisiorek, A. Gaĝor, *Chem. Mater.*, **37** (2025) 7125-7135.
[2] T. J. Bednarchuk, M. N. Rowińska, O. Korolevych, D. Stefańska, A. Gaĝor, *Inorg. Chem.*, (2026) accepted for publication.

INVESTIGATION OF DIRECT Z-SCHEME CHARGE TRANSFER IN SELECTED MORPHOLINIUM-BASED BISMUTH(III) HALIDE

**Oleksandr Korolevych, Tamara J. Bednarchuk, Magdalena N. Rowińska,
Dagmara Stefańska, Anna Gaĝor**

*Institute of Low Temperature and Structural Research, Polish Academy of Science,
Okólna 2, 50-422 Wrocław, Poland*

This work, conducted as part of broader research, focused on the theoretical investigation of newly synthesized organic–inorganic metal-halide double perovskite related material using Density Functional Theory (DFT), intending to understand the properties of the selected material and its behaviour.

First-principles calculations based on DFT were carried out using the QUANTUM ESPRESSO package (version 6.8) [1,2]. Were used exchange–correlation functional Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) [3] with the projector augmented-wave (PAW) [4] pseudopotentials. The partial density of states (PDOS), band structure, and carrier effective masses were calculated for $(\text{MOR})_2\text{CsBiCl}_6$.

From band structures, PDOS analysis, and charge density maps, clearly can be distinguished the electronic contributions originating from $\text{Bi}(1)\text{Cl}_6$ and $\text{Bi}(2)\text{Cl}_6$ octahedra. These photosystems exhibit distinct band edge positions, resulting in a band gap offset between them. The Cs^+ cations act as a spacer and form an interface separating the two octahedral environments, thereby suppressing Fermi-level equilibration and preserving band offset. Consequently, the interesting band alignment promotes spatial charge separation and supports direct Z-scheme charge transfer, see figure 1 (data obtained from GGA/PBE calculations). Electrons are predominantly localized on the $\text{Bi}(1)\text{Cl}_6$ units, whereas holes accumulate on the $\text{Bi}(2)\text{Cl}_6$ octahedra.

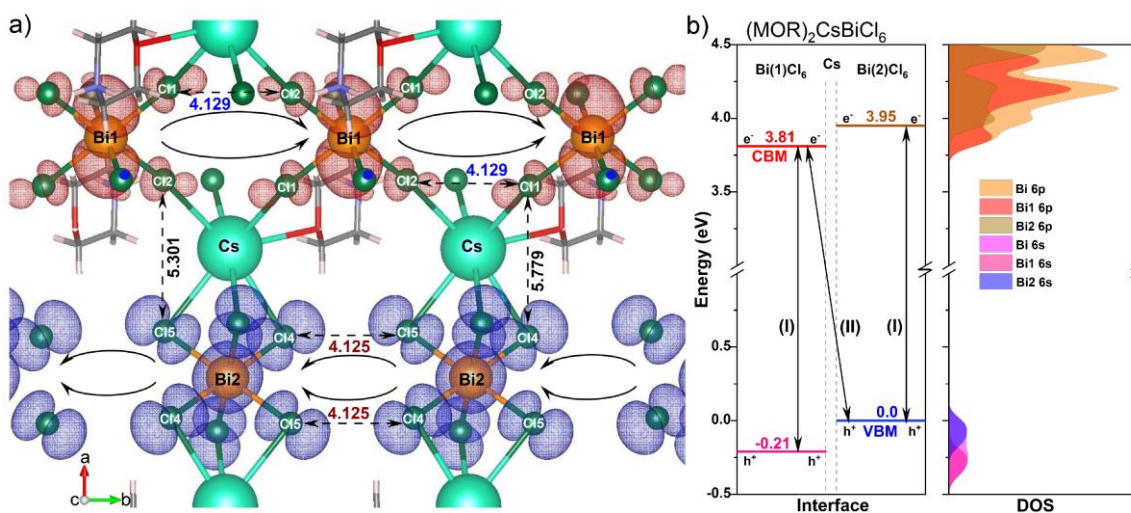


Fig. 1. (a) Fragment of compound $(\text{MOR})_2\text{CsBiCl}_6$ showing selected geometric parameters (Å) and calculated electronic charge densities for the VBM (blue) and CBM (red). (b) Schematic representation of a Z-scheme heterojunction between crystallographically independent $\text{Bi}(1)\text{Cl}_6$ and $\text{Bi}(2)\text{Cl}_6$ units, together with scalar relativistic PDOS of Bi^{3+} .

A-16

In this system, the transitions may be described: "inner" p - p transition with s-p hybridization (I), inside the anionic unit, and "inter" p - p transition with s-p hybridization (II), Z-scheme mechanism, (VBM) from Bi(2)Cl₆ to (CBM) from Bi(1)Cl₆. The energetic difference between transitions (I) and (II) is noticeable, which makes the indirect transition possible. To experimentally verify these findings, measurements of the Photoluminescence excitation (PLE) and Photoluminescence (PL) spectra were performed at 80 K to characterize the observed emission. The experiments confirmed the Z-type mechanism, reveal two emission bands at 400 and 436 nm with different recombination mechanisms.

This research was funded by the National Science Centre (Narodowe Centrum Nauki) in Poland under Project No. UMO-2021/43/B/ST5/01172.

Calculations have been partially carried out at the Wrocław Centre for Networking and Supercomputing <<http://www.wcss.wroc.pl>> (Grant no. hpc-olekor30-1728571513).

Literature

- [1] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. De Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R. M. Wentzcovitch, QUANTUM ESPRESSO: A Modular and Open-Source Software Project for Quantumsimulations of Materials. *J. Phys.: Condens. Matter*, **21**(39) (2009) 395502.
- [2] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. Buongiorno Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni, N. Colonna, I. Carnimeo, A. Dal Corso, S. De Gironcoli, P. Delugas, R. A. Distasio, A. Ferretti, A. Floris, G. Fratesi, G. Fugallo, R. Gebauer, U. Gerstmann, F. Giustino, T. Gorni, J. Jia, M. Kawamura, H. Y. Ko, A. Kokalj, E. Küçükbenli, M. Lazzeri, M. Marsili, N. Marzari, F. Mauri, N. L. Nguyen, H. V. Nguyen, A. Otero-De-La-Roza, L. Paulatto, S. Poncé, D. Rocca, R. Sabatini, B. Santra, M. Schlipf, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, I. Timrov, T. Thonhauser, P. Umari, N. Vast, X. Wu, S. Baroni, Advanced Capabilities for Materials Modelling with Quantum ESPRESSO. *J. Phys.: Condens. Matter*, **29**(46) (2017) 465901.
- [3] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, C. Fiolhais, Atoms, Molecules, Solids, and Surfaces: Applications of the Generalized Gradient Approximation for Exchange and Correlation. *Phys. Rev. B*, **46**(11) (1992) 6671.
- [4] A. Dal Corso, Pseudopotentials periodic table: From H to Pu. *Comput. Mater. Sci.*, **95** (2014) 337–350.

ELECTRON DIFFRACTION FOR EVERYONE: NEW PROTOCOLS AND TEM EMULATOR IN INSTAMATIC

Daniel Mariusz Tchoń¹, Viljar Johan Femoen², Lukáš Palatinus¹

¹ *Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, 182 00 Prague, Czech Republic*

² *Department of Chemistry, Stockholm University, SE-106 91 Stockholm, Sweden*

With beam characteristics and interaction cross-sections unmatched by photon sources, 3D electron diffraction (3D ED) keeps extending crystallography to ever smaller and more challenging targets. While any transmission electron microscope (TEM) can record microdiffraction, the best acquisition strategy depends on the sample: a beam suitable for a mineral sample may rapidly damage an organic one. Likewise, a precise single-crystal protocol will be ill-suited to map phase distribution across grains [1-3].

The simplest 3D ED protocol rotates the crystal and collects diffraction stepwise. This rotation ED (RED) can be further refined by precessing the beam or acquiring data continuously, as in “PED”, “cRED”, or “Fast-ADT”. Each variant can be also automated. Through image recognition and clustering, serial 3D ED approaches reduce beam damage by distributing the total dose over hundreds of crystals [4-8].

As the new ED protocols rapidly push the state of the art, interoperability often lags behind methodological progress. In practice, ED structure determination is frequently constrained more by implementation and human factors rather than fundamental limitations. For the wider community, a new experimental protocol is only as valuable as it is available and reproducible across different TEM platforms. Therefore, open protocols and independent software constitute an essential foundation for responsible development of the field.

Here I will present the recent developments in Instamatic – an open-source 3D ED data-collection software suite designed for interoperability. Instamatic implements all the protocols mentioned above through a generalised interface that translates commands for different TEMs at runtime [8]. I will showcase recent improvements incl. new interfaces, calibrations, experimental protocols, compatibility fixes, and visualisation tools [9]. I will present a new emulator that allows for teaching and basic development in ED without access to a live TEM [10]. Finally, I will discuss recent progress towards a new serial precession-assisted experimental routine that minimises beam damage by replacing direct-space detection and tracking with long continuous scans over the grid.

Literature

- [1] T. Gruene, E. Mugnaioli, *Chem. Rev.*, **121** (2021) 11823–11834.
- [2] D. Shi, R. Huang, *Front. Mol. Biosci.*, **9** (2022) 988928.
- [3] M. H. Hansen, A. L. Wang, J. Dong, Y. Zhang, T. Umale, et al., *Microstructures*, **3** (2023) 2023029.
- [4] M. Gemmi, A. E. Lanza, *Acta Cryst.*, **B75** (2019) 495–504.
- [5] D. Zhang, P. Oleynikov, S. Hovmöller, X. Zou, *Z. Kristallogr.*, **225** (2010) 94–102.
- [6] Y. Luo, B. Wang, S. Smeets, J. Sun, W. Yang, X. Zou, *Nature Chemistry*, **15** (2023) 483–490.
- [7] Y. Luo, Y. Deng, B. Wang, J. Chen, W. Yang, X. Zou, *J. Appl. Cryst.*, **58** (2025) 1986–1994.
- [8] S. Smeets, X. Zou, W. Wan, *J. Appl. Cryst.*, **51** (2018) 1262–1273.
- [9] S. Smeets, B. Wang, E. Hogenbirk, D. Rainer, D. M. Tchoń *Zenodo* (2026) Instamatic (2.2.1).
- [10] D. M. Tchoń, V. J. Femoen (2026). <https://github.com/instamatic-dev/instamatic-TEM-emulator>.

Co-funded by the European Union (Physics for Future – Grant Agreement No. 101081515)

CHAOS AND ORDER IN APERIODIC 2D LATTICES

Arkadiusz Ciesielski, Anna Sadocha*University of Warsaw, Faculty of Chemistry, Pasteura 1, 02-093 Warsaw*

The discovery of quasicrystals shook the scientific world to such an extent that recognized authorities initially regarded it as merely an artifact. Ultimately, this discovery was honoured with a Nobel Prize, and the definition of a crystal had to be extended to include aperiodic systems. An excellent two-dimensional model of quasicrystals was the Roger Penrose tiling proposed much earlier. Its aesthetic, based on breaking away from periodic filling of the plane, still fascinates today, and in many places, this motif has been used as an original flooring design. The Fourier transform of Penrose's aperiodic patterns turned out to be consistent with the diffraction patterns of quasicrystals exhibiting fivefold rotational symmetry. To completely cover the plane, Penrose used two types of tiles. Until recently, the question was whether it is possible to find a single tile that could cover the plane exclusively in an aperiodic manner. Two years ago, a publication appeared proposing such a tile [1], and shortly thereafter, it turned out that there could be infinitely many of them. Unlike the Penrose tiling, the aperiodic tiling with a single tile is pseudo-hexagonal.

In the considerations presented in our report, we address the problems of symmetry of such tilings, taking into account images obtained from the Fourier transform and analyzing aperiodicity in one-dimensional projections of such a lattice. It is known that quasicrystals with hexagonal symmetry exist [2], for which a model could be a two-dimensional space covered by a single aperiodic tile.

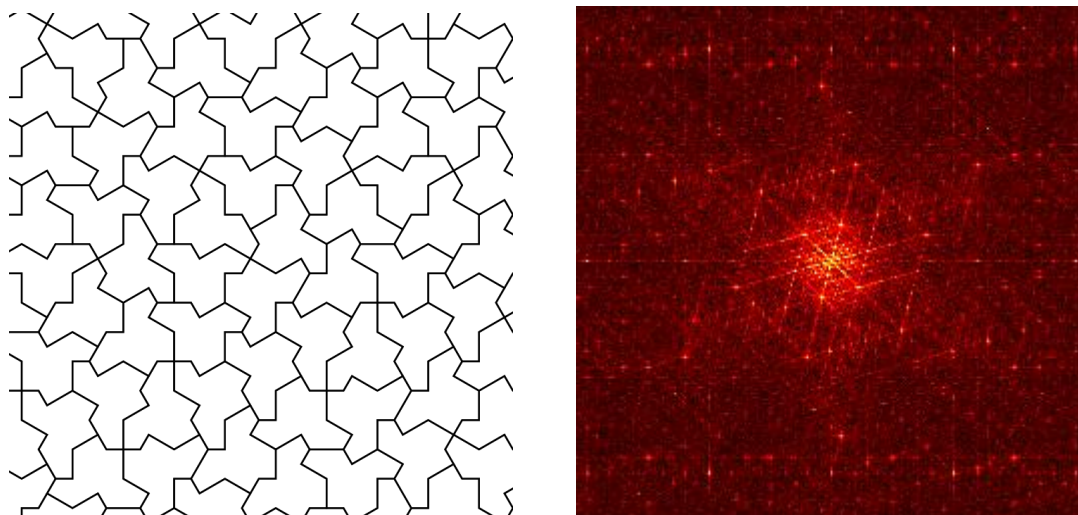


Fig. 1. Aperiodic tiling and its Fourier transform

Literature

- [1] D. Smith, J. S. Myers, C. S. Kaplan, C. Goodman-Strauss, An aperiodic monotile. *Combinatorial Theory*, **4**(1) (2024).
- [2] T. Dotera, S. Bekku, P. Zihler; Bronze-mean hexagonal quasicrystal. *Nature Materials*, **16** (2017) 987–992.

CRYSTAL GROWTH AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF NdAsSe SINGLE CRYSTALS

Tetiana Romanova*, Dorota A. Kowalska, Dariusz Kaczorowski

*Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences,
Okólna 2, 50-422 Wrocław, Poland*

**e-mail: t.romanova@intibs.pl*

Rare-earth pnictide–chalcogenide compounds attract increasing attention due to the complex interplay between their crystal structure, magnetism, and electronic properties. Materials containing localized 4f electrons offer a unique platform for studying correlated phenomena and their coupling to structural features.

In this context, NdAsSe is a promising candidate owing to its low-dimensional crystal structure of the CeAsS type, which features a characteristic doubling of the unit cell along the c-axis, together with the presence of magnetically active Nd³⁺ ions. While basic structural information on this compound is available in the literature, its detailed structure and physical properties still require further experimental investigation.

Single crystals of NdAsSe were successfully grown by the chemical vapor transport (CVT) method using iodine as a transport agent. The quality and orientation of the crystals were evaluated using Laue diffraction. The chemical composition and homogeneity were examined by energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS). Phase purity and lattice parameters were determined by powder X-ray diffraction (PXRD), confirming the formation of a single-phase material consistent with the literature data. Additionally, differential thermal analysis (DTA) was performed to investigate the thermal stability and possible phase transitions of the compound.

The obtained high-quality single crystals provide a solid foundation for further anisotropic studies of the magnetic, transport, and potential topological properties of NdAsSe.

This work was supported by the National Science Centre, Poland, under grant no. 2025/09/X/ST5/00398 (MINIATURA 9).

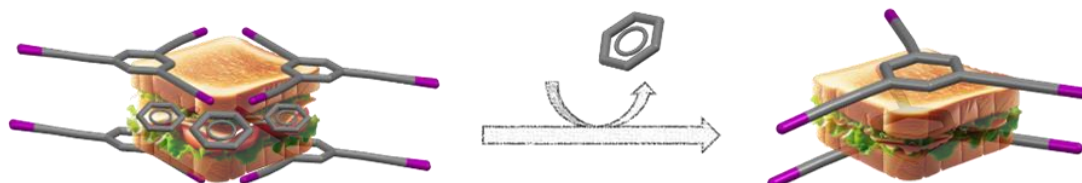
SYNERGIA WIĄZAŃ HALOGENOWYCH I ODDZIAŁYWAŃ π - π STACKING JAKO SIŁA NAPĘDOWA POLIMORFIZMU

Marcin S. Małecki¹, Marcin Moskwa², Przemysław Dopieralski²,
Sławomir Szafert²

¹ Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo náměstí 542/2 160 00 Praha

² Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski, F, Fryderyka Joliot-Curie 14,
50-300 Wrocław

Zrozumienie mechanizmów prowadzących do powstawania różnych form polimorficznych danego związku stanowi kluczowe wyzwanie współczesnej chemii fizycznej i ma istotne znaczenie dla projektowania nowych materiałów funkcjonalnych, w tym substancji farmaceutycznych. W niniejszej pracy zostaną przedstawione i omówione mechanizmy formowania dwóch polimorfów związku poliinowego. Struktury obu form zostały jednoznacznie określone za pomocą analizy rentgenowskiej monokryształów. Powstanie polimorfów wynika z subtelnej równowagi pomiędzy wiązaniami halogenowymi a rozległą siecią niekowalencyjnych oddziaływań π - π stacking. Połączenie badań eksperymentalnych (dyfrakcja rentgenowska) z obliczeniami teoretycznymi pozwoliło zbudować spójny model wyjaśniający preferencyjne tworzenie się obu modyfikacji polimorficznych [1].



Rys. 1. Wpływ rozpuszczalnika na tworzenie odmiany polimorficznej

Literatura

[1] M. S. Małecki, M. Moskwa, P. Dopieralski, S. Szafert, *ChemPhysChem*, **26** (2025) e202500491.

BADANIE POLIMOFRIZMU KRYSZTAŁÓW FLURBIPROFENU. OD KOKRYSTALIZACJI Z AMINAMI HETEROAROMATYCZNYMI PO METODY UWALNIANIA Z UKŁADÓW BINARNYCH

Dorota Krasowska¹, Przemysław Nowak^{1,2}, Marta K. Dudek¹

¹ *Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk
w Łodzi, ul. Sienkiewicza 112, Łódź 90-363, Polska*

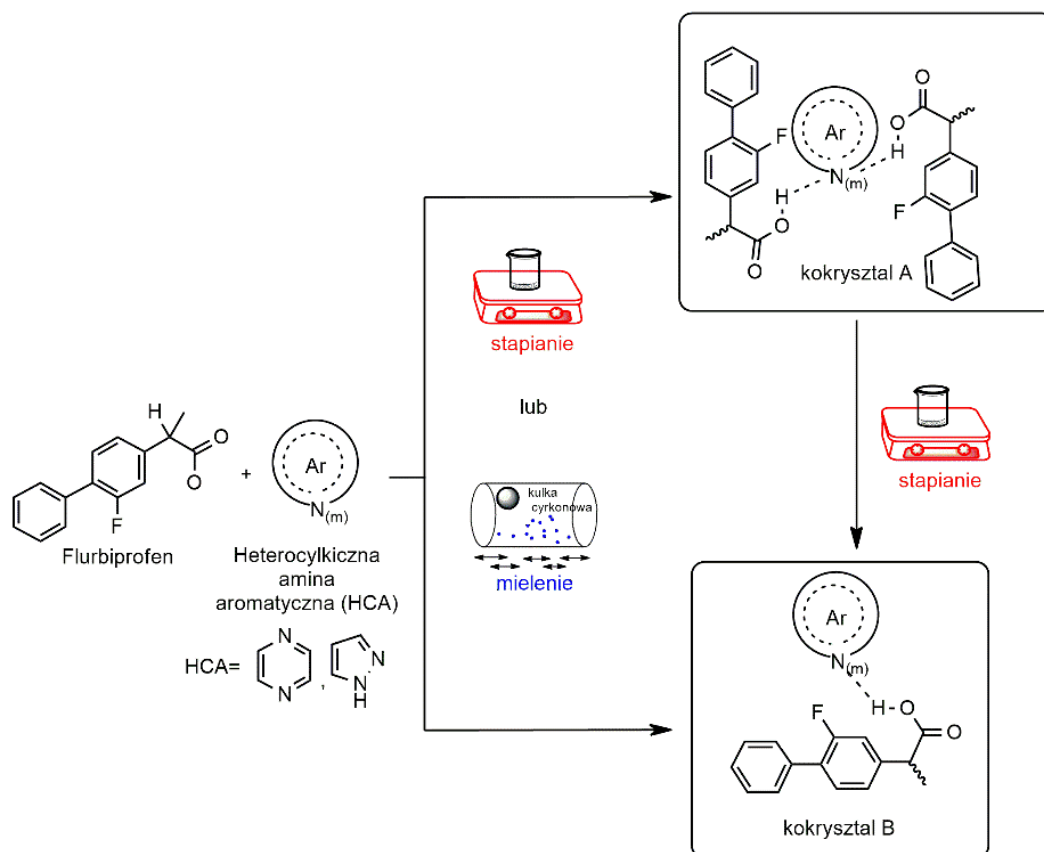
² *Szkoła Doktorska BioMedChem UŁ i Instytutów PAN w Łodzi, ul. Matejki 21/23,
90-237 Łódź*

Polimorfizm krystaliczny odnosi się do zdolności cząsteczki do występowania w różnych formach krystalicznych zwanych polimorfami, z których każdy charakteryzuje się unikalnym układem upakowania w sieci krystalicznej [1]. Te różnice w strukturze krystalicznej mogą skutkować odmiennymi właściwościami chemicznymi i fizycznymi takimi jak stabilność i biodostępność, co jest szczególnie ważne w przypadku substancji o zastosowaniach medycznych.

Do poszukiwań innych form polimorficznych, w tym opracowania nowych podejść uzyskania innych form krystalicznych zaangażowaliśmy flurbiprofen, należący do aktywnych składników farmaceutycznych (API), który już w 1987 roku został zatwierdzony do stosowania medycznego jako środek przeciwbólowy, przeciwgorączkowy i przeciwzapalny. Naszym celem było pogłębienie wiedzy na temat polimorfizmu flurbiprofenu [2,3] poprzez badanie procesów kokrystalizacji i późniejszego uwalniania jednego ze składników kokryształu poprzez metodę termicznej dekokrystalizacji, która okazała się alternatywnym podejściem do otrzymania metastabilnej struktury polimorficznej flurbiprofenu.

W tym celu otrzymaliśmy kokryształy flurbiprofenu z heteroaromatycznymi aminami: pirazyną lub pirazolem poprzez stopienie oraz mielenie na sucho (lub z dodatkiem LAG) w wibracyjnym młynie kulowym Retscha (Rys. 1). Po uformowaniu kokryształów, oceniliśmy ich rozkład termiczny, zbadaliśmy przemiany fazowe i potencjał zmian polimorficznych flurbiprofenu. Podsumowanie wyników ich przygotowania, analiza przemian fazowych, określenie struktury otrzymanych kokryształów oraz opracowanie metody termicznego uwalniania jednego ze składników kokryształu z utworzeniem odpowiedniej formy polimorficznej flurbiprofenu będą przedmiotem niniejszej prezentacji.

A-21



Rys. 1. Dwa podejścia do otrzymania różnych strukturalnie form kokryształów flurbiprofenu z pirazyną lub pirazolem.

Finansowanie

Badania były finansowane w ramach grantu NCN SONATA BIS 2022/46/E/ST4/00392 (MD).

Literatura

- [1] A. Y. Lee, D. Erdemir, A. S. Myerson, *Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng.*, **2** (2011) 259–280.
- [2] A. L. Grzesiak, A. J. Matzger, *J Pharm Sci.*, **96**(11) (2007) 2978–2986.
- [3] J. O. Henck, M. Kuhnert-Brandstätter, *J Pharm Sci.*, **88** (1999) 103–108.

X-RAY DIFFRACTION STUDIES OF 6-CHLORO[1,2,4]TRIAZOLO[4,3-B]PYRIDAZINE CRYSTALS OBTAINED AT VARIED THERMODYNAMIC CONDITIONS

Mateusz Józwiak, Anna Olejniczak

*Department of Materials Chemistry, Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz
University, Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań*

6-Chloro[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazine, $C_5H_3N_4Cl$, is an aromatic heterocyclic compound, belonging to the group of pyridazine derivatives, exhibiting a wide range of biological activity, including hypotensive activity, antibacterial, cytotoxic or enzyme inhibitory properties [1-4]. Moreover, their potential application as low-sensitivity high-energy materials was also investigated [5].

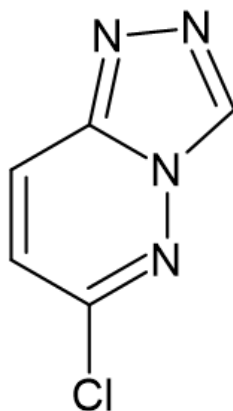


Fig. 1. 6-Chloro[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazine.

Crystals of 6-chloro[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazine were studied at varied thermodynamic conditions. This compound is solid at ambient conditions and can exist in two polymorphs: orthorhombic α ($Pbca$ space group) and monoclinic β ($P2_1/c$ space group), however the last one is metastable and disappears after some time. High-pressure x-ray diffraction studies revealed that the orthorhombic form is retained on compression up to 0.90 GPa at least. However, high-pressure recrystallization inevitably leads to the monoclinic form, already at low pressure value of 0.05 GPa, which remains stable on further compression up to 1.77 GPa. Nevertheless, phase transition between α and β polymorphs was not observed and particular forms could be obtained by applying specific recrystallization method and conditions. Crystal structure of polymorph α was also retained on lowering temperature to 100 K at ambient pressure.

Molecular packing in both phases is governed not only by the C–H \cdots N hydrogen bonds, characteristic for this type of compounds, but also by the N \cdots Cl interactions. They join molecules into layers in both forms. The X-ray diffraction studies and further data analysis provided information about the compound behaviour under different thermodynamic conditions and their influence on molecular arrangement and patterns of intermolecular interactions.

Literature

- [1] A. A. Abu-Hashem, U. Fathy, M. A. Gouda, Synthesis of 1,2,4-triazolopyridazines, isoxazolofuopyridazines, and tetrazolopyridazines as antimicrobial agents. *J Heterocyclic Chem.*, **57** (2020) 3461–3474.
- [2] E. M. Ahmed; N. A. Khalil; A. T. Taher; R. H. Refaey; Y. M. Nissan, Triazolopyridazine Derivatives: Synthesis, Cytotoxic Evaluation, c-Met Kinase Activity and Molecular Docking. *Bioorg. Chem.*, **92** (2019) 103272.
- [3] A. Katrusiak, E. Melzer, S. Bałoniak, T. Bobkiewicz, P. Polcyn, Triazolo- and Tetrazolopyridazine Derivatives and Their Hypotension and Heart Rate Activity. *Acta Pol. Pharm.*, **58** (2001) 217–223.
- [4] A. M. Ganai, T. K. Pathan, S. B. Mohite, V. Vojáčková, E. Řezníčková, K. Kozlanská, V. Kryštof, K. Govender, S. Mokoena, S. R. Merugu, M. Palkar, K. Moodley, R. Karpoomath, Design and Synthesis of Novel 1,2,4-Triazolo[4,3-b]Pyridazine Derivatives with Anti-Cancer Activity. *J. Mol. Struct.*, **1291** (2023) 135938.
- [5] S. Chen, W. Zhang, Y. Wang, Q. Zhang, [1,2,4]Triazolo[4,3-b]Pyridazine as a Building Block towards Low-Sensitivity High-Energy Materials. *Chem. Eng. J.*, **421** (2021) 129635.

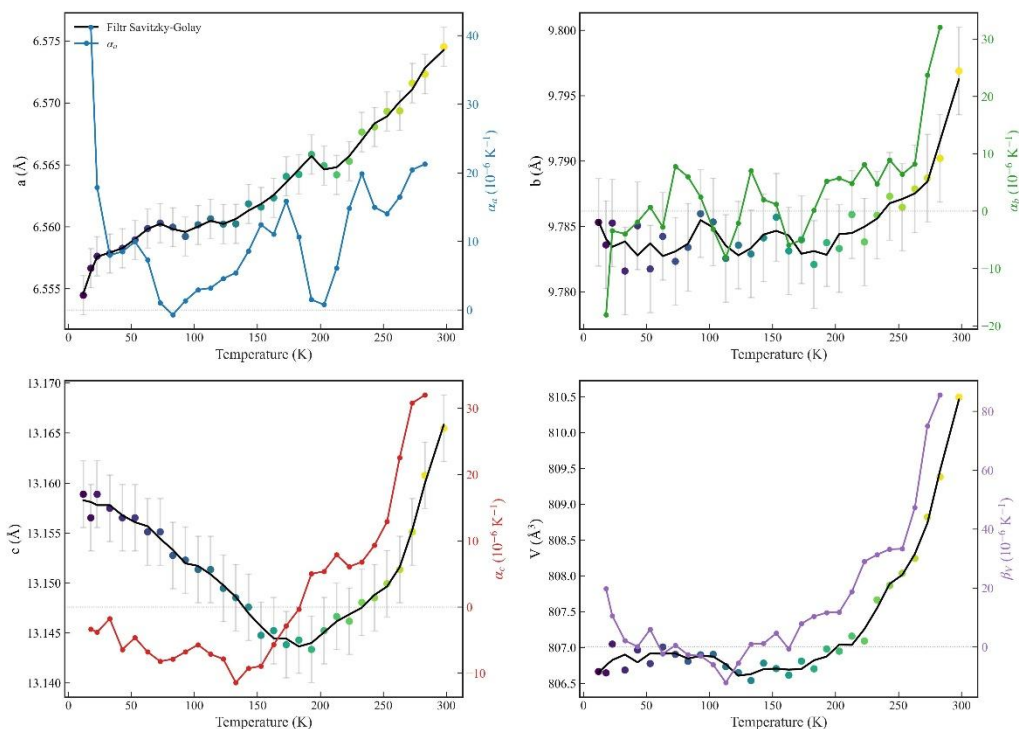
STRUCTURAL CHARACTERIZATION AND ANOMALOUS THERMAL EXPANSION COEFFICIENT OF CuInP_2S_6 AT CRYOGENIC TEMPERATURES

Magdalena Wietrzyńska, Rafał Bartoszewicz, Jarosław Serafińczuk, Robert Kudrawiec

Department of Semiconductor Materials Engineering, Wrocław University of Science and Technology, Wyb. Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Poland

CuInP_2S_6 is a semiconductor with many interesting properties. Firstly, it belongs to the family of ferroelectric materials, and its phase transition temperature is 315 K [1], thus providing a phase transition above room temperature. Interestingly, this material possesses a direct energy bandgap in the ferroelectric phase and remains stable under normal conditions [2], making it a candidate for potential applications in non-volatile memory, sensors, and electronic devices [3].

Due to the aforementioned properties, this material has piqued our interest and became the subject of the present study. Powder X-ray diffraction measurements allowed for the determination of the lattice parameters of the unit cell. Crucially, these structural studies revealed a negative thermal expansion behavior, manifested as a negative thermal expansion coefficient along the c-axis at temperatures below 190 K, as well as a volumetric negative thermal expansion observed in the temperature range from 50 to 130 K. These studies were conducted using a Malvern-Panalytical Empyrean diffractometer with a copper lamp ($\lambda = 1.540598 \text{ \AA}$). Temperature control was facilitated by an Oxford Phenix cryostat.



Literature

- [1] V. Maisonneuve, V. B. Cajipe, A. Simon, R. Von Der Muhll, J. Ravez. Ferrielectric ordering in lamellar CuInP_2S_6 . *Phys. Rev. B Condens. Matter*, **56**(17) (1997) 10860–10868.
- [2] X.-Q. Yan, X. Zhao, H. Xu, L. Zhang, D. Liu, Y. Zhang, J.-G. Tian, Temperature-tunable optical properties and carrier relaxation of CuInP_2S_6 crystals under ferroelectric-paraelectric phase transition. *Journal of Materials Chemistry. C, Materials for Optical and Electronic Devices*, **10**(2) (2022) 696–706. DOI: 10.1039/d1tc04984d
- [3] M. Zhao, G. Gou, X. Ding, J. Sun, An ultrathin two-dimensional vertical ferroelectric tunneling junction based on CuInP_2S_6 monolayer. *Nanoscale*, **12**(23) (2020) 12522–12530. DOI: 10.1039/d0nr01475c

A-24

DIAGRAM FAZOWY DLA KULKI LaAlO_3

**Paweł Tomaszewski¹, Przemysław Matkowski², Dawid Drozdowski¹,
Natalia Miniajluk-Gawel¹, Zofia Mazurkiewicz¹, Przemysław Szklarz³**

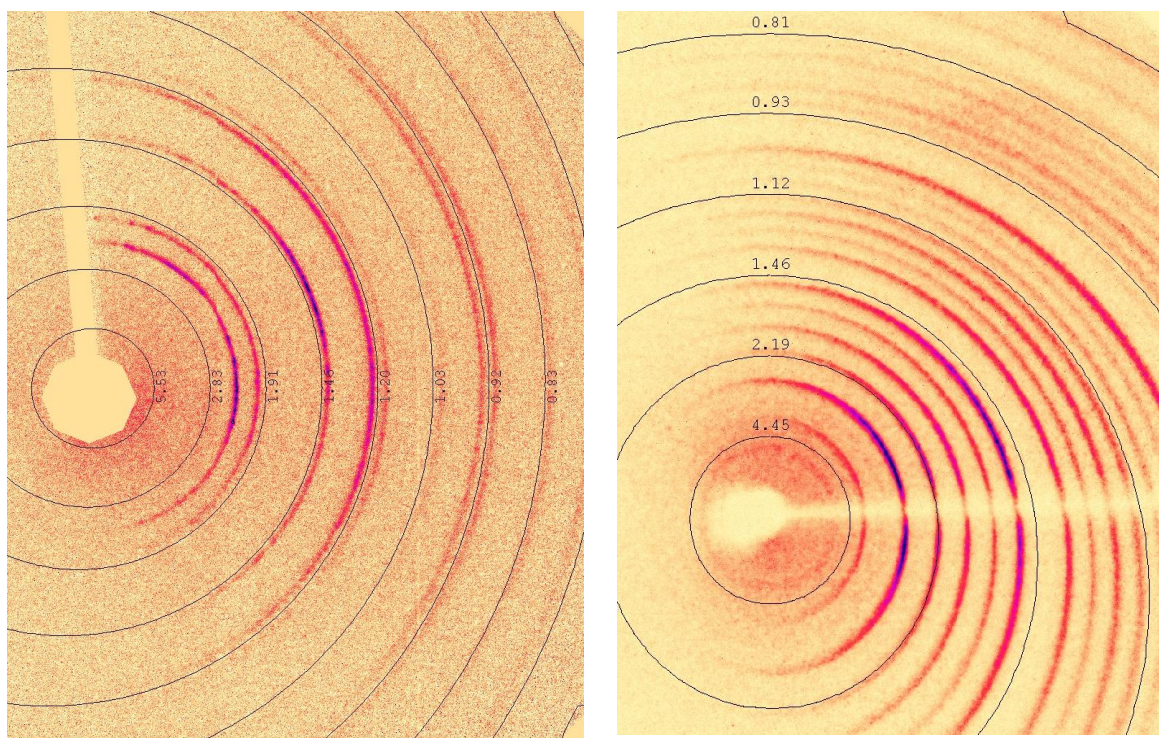
¹ *Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych, Polska Akademia Nauk,
ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław*

² *Wydział Elektroniki, Fotoniki i Mikrosystemów, Politechnika Wrocławska,
ul. Długa 61-65, Wrocław*

³ *Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław*

Pomiary tomografii komputerowej, dyfrakcji proszkowej, DSC i warstwowe ścieranie kulki ujawniły nieoczekiwany wynik – diagram fazowy jest inny dla ceramicznej kulki LaAlO_3 niż dla proszku. Wbrew dotychczasowym ustaleniom nie mamy w kulce ani fazy trygonalnej, ani regularnej. Faza wysokotemperaturowa jest rombowa o parametrach sieciowych $a = 5.321(1)$, $b = 3.771(1)$, $c = 2.675(1)$ Å ściśle związanych ze znaną komórką regularną ($a = 3.7$ Å). Pomiary strukturalne fazy poniżej przemiany fazowej są niejednoznaczne. Przemiana fazowa w okolicy 800°C jest nieodwracalna.

Dodatkowo, okazało się, że tzw. *struktura Shreka* jest sprzężona z przemianą fazową i nie pojawia się stopniowo wraz z wygrzewaniem kulki.



Rys. 1. Faza niskotemperaturowa (z lewej) i wysokotemperaturowa (z prawej).

DETAILED STUDY OF THE INFLUENCE OF RE ELEMENT TYPE ON POSITIONAL DISORDER IN F-TYPE ICOSAHEDRAL ZN-MG-RE BERGMAN-TYPE QUASICRYSTAL

Radosław Strzałka, Maciej Żak, Ireneusz Bugański, Janusz Wolny

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, AGH w Krakowie

Our recent studies focus on quest for magnetism in Bergman-type icosahedral quasicrystals. We investigate ZnMgRE and ZnMgTM systems, where rare-earth or transition-metal atoms arranged in aperiodic manner are hoped to give rise to magnetic properties of the system [1].

In this presentation, we report results of a more detailed study on positional disorder resulting from changes in electron density in 2D sections of a 6D electron density map of Bergman-type icosahedral ZnMgRE system. Simialar effects have been observed for other icosahedral systems [2,3].

We performed a number of structure solutions using SUPERFLIP software, based on single-crystal X-Ray diffraction data collected with in-house diffractometer, and cuts on 6D electron density for systems with selected RE={Er, Ho, Tm, Tb, Dy, Y} atoms. The study involved a comparison of the amount of electron density concentrated in occupation domains relative to the type of RE element.

The results show the substantial differencies in electron densities in 3f and 5f sections of the 6D maps suggesting a positional disorder appearing in 3D structure.

Literature

- [1] S. Vrtnik et al., Non-ergodic states in icosahedral quasicrystals Zn-Mg-RE (RE = Tm, Er, Ho) (2025), conference contribution; S. Vrtnik et al., Magnetic properties of Bergman-type icosahedral Zn-Mg-Tm quasicrystals (2025), conference contribution.
- [2] I. Buganski et al., *Acta Cryst. B*, **82** (2026), 175.
- [3] T. Yamada et al., *Acta Cryst. B*, **73** (2017), 1125.

HIGH-PRESSURE CRYSTALLIZATION OF THYMOL

Kinga Roszak, Andrzej Katrusiak

*Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8,
61-614 Poznań*

Thymol is a natural compound with a characteristic aroma and broad culinary and pharmaceutical applications. Owing to its molecular structure and hydrogen-bonding capabilities, thymol is closely related to menthol. The crystal structure of thymol phase α (trigonal, space group $R\bar{3}$) was previously determined by Thozet and Perrin [1], who established that the molecules in the hydroxyl conformation anti are hydrogen-bonded into cyclic hexamers.

At 296 K, phase α remains stable up to 2.25 GPa; above this pressure it transforms into the triclinic phase β (space group $P\bar{1}$). High-pressure recrystallization above 1.0 GPa additionally reveals a hidden monoclinic phase γ of space group $P2_1/c$. The exceptional feature of these thymol phases is the different H-bonding aggregation mode in their structures, either cyclic hexamers in phases α and β and chains in the phase γ .

The α -to- γ phase transition is hindered by a conformational rearrangement that modifies the geometry and strength of the hydrogen bonds, thereby altering the preferred aggregation mode. This interplay between molecular conformation and intermolecular interactions provides insight into crystal aggregation mechanisms and contributes to a better understanding of the behaviour of small flexible molecules in biological systems.

Literature

[1] A. Thozet, M. Perrin, *Acta Cryst. B*, **36** (1980) 1444.

PRESSURE-INDUCED EFFECTS IN BRØNSTED-LOWRY ACID-BASE COCRYSTALS

Ewa Patyk-Kaźmierczak*

*Adam Mickiewicz University, Poznań
Faculty of Chemistry, Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań, Poland*

**e-mail: ewapatyk@amu.edu.pl*

Pressure is a stimulus well known to induce significant changes in the structure of solid-state materials: from polymorphism, through negative linear and area compressibility, to chemical reactions [1,2]. All these effects have been observed for monocomponent organic crystals, which remain more frequently investigated under extreme conditions compared to multicomponent crystals [3]. However, the compositional diversity offered by the latter can significantly broaden the scope of high-pressure investigations by providing closely related systems ideal for understanding how crystals respond to a stimulus depending on their chemical composition.

A series of organic cocrystals based on dicarboxylic acids and bipyridines was investigated under high pressure upon isothermal compression, using X-ray diffraction, Raman, and IR techniques, supported by DFT calculations. A number of pressure-induced effects were observed, with polymorphic solid-to-solid transformations being the most common [3-5]. Additionally, proton-transfer reactions between acid and base molecules were successfully induced, resulting in the transition of cocrystals into salts [3,6], and cases of unusual compressibility (negative linear compressibility) were detected [5,7].

Herein, I present a summary of the results of the high-pressure investigation of Brønsted-Lowry acid-base cocrystals, highlighting the changes in the crystal's response to pressure linked to variations in the chemical composition.

The funding from National Science Centre, Poland (grant No. UMO-2020/39/D/ST4/00260) is kindly acknowledged.

Literature

- [1] A. Katrusiak, *Acta Cryst A*, **64** (2008) 135–148.
- [2] R. Bini et al., *Chem. Phys.*, **398** (2012) 262–268.
- [3] E. Patyk-Kaźmierczak et al., *IUCrJ*, **11** (2024) 168–181.
- [4] M. Kaźmierczak, E. Patyk-Kaźmierczak, *Cryst. Growth Des.*, **26** (2026) 3309–3317.
- [5] E. Patyk-Kaźmierczak, K. Szymañska, M. Kaźmierczak, *IUCrJ*, **12** (2025) 88–96.
- [6] E. Patyk-Kaźmierczak et al., *J. Mol. Struct.*, **1367** (2026) 146179.
- [7] E. Patyk-Kaźmierczak, M. Kaźmierczak, *Chem. Commun.*, **60** (2024) 10310–10313.

**THE FIRST NATURAL COMPOUND OF TRIVALENT
MOLYBDENUM – FERRODIMOLYBDENITE, $\text{FeMo}^{3+}_2\text{S}_4$, FROM
JORDAN**

**Maria Książek¹, Evgeny V. Galuskin², Irina O. Galuskina², Joachim Kusz¹,
Yevgeny Vapnik³, Grzegorz Zieliński⁴**

¹ *Institute of Physics, Faculty of Science and Technology, University of Silesia,
75. Pułku Piechoty 1, 41-500 Chorzów, Poland*

² *Institute of Earth Sciences, Faculty of Natural Sciences, University of Silesia,
Będzińska 60, 41-200 Sosnowiec, Poland*

³ *Department of Earth and Environmental Sciences, Ben-Gurion University
of the Negev, P.O.B. 653, Beer-Sheva 84105, Israel*

⁴ *Polish Geological Institute – National Research Institute, Rakowiecka 4,
00-975 Warszawa, Poland*

New mineral ferrodimoledenite with ideal formula $\text{FeMo}^{3+}_2\text{S}_4$ ($C2/c$, $a = 11.8249(8) \text{ \AA}$, $b = 6.5534(3) \text{ \AA}$, $c = 13.0052(10) \text{ \AA}$, $\beta = 114.474(9)^\circ$, $V = 917.27(12) \text{ \AA}^3$, and $Z = 8$) is the first trivalent molybdenum compound discovered in nature. Ferrodimoledenite with the empirical formula $(\text{Fe}^{2+}_{0.99}\text{Cu}^{2+}_{0.07}\text{Ni}^{2+}_{0.04})_{\Sigma 1.10}\text{Mo}^{3+}_{1.94}(\text{S}^{2-}_{3.98}\text{P}^{3-}_{0.02})_{\Sigma 4.00}$ was discovered in a differentiated sulfide nodule composed of troilite and pentlandite. The nodule was detected in the central zone of a diopside–anorthite–tridymite oval paralava body, ~30 metres in diameter, within the pyrometamorphic Hatrurim Complex in Daba-Siwaqa, Jordan [1].

The structure of ferrodimoledenite differs from the structure of its synthetic analogue. Ferrodimoledenite has a centrosymmetric structure, where two types of Mo-octahedra and one type of Fe-octahedra are present. In the synthetic analogue ($C1c1$) there is no inversion centre and a reduction in symmetry is illustrated by the presence of 4 types of Mo-octahedra and 2 types of Fe-octahedra [2,3]. The ferrodimoledenite structure can be considered as a molybdenite structure, where molybdenite layers are divided by parallel columns of Fe-octahedra [1]. Molybdenum in the layers has a valence of 3+, unlike the typical Mo valence in molybdenite, which is 4+.

Ferrodimoledenite forms platy crystals with dimensions ranging from $3 \times 100 \mu\text{m}$ to $20 \times 40 \mu\text{m}$. The mineral exhibits a grey colour and a dark grey streak. The cleavage observed in the mineral is perfect on $\{001\}$, good on $\{100\}$ and poor on $\{010\}$. The crystallisation of ferrodimoledenite occurred in reduced conditions in monosulfide Fe(+Ni) melt at a temperature of 1000–1100°C and at low pressure [1].

The discovery of ferrodimoledenite was the basis for a revision of studies of the meteorites, which was reflected in the discovery of ferrodimoledenite in meteorites by other researchers.

Acknowledgements. Investigations were partially supported by the National Science Centre of Poland Grant No. 2021/41/B/ST10/00130.

Literature

- [1] E. V. Galuskin, I. O. Galuskina, J. Kusz, M. Książek, Y. Vapnik, G. Zieliński, *Mineral. Mag.*, **89** (2025) 242.
[2] J. Guillevic, J.-Y. Le Marouille, D. Grandjean, *Acta Cryst. B*, **30** (1974) 111.
[3] P. Vaqueiro, M. L. Kosidowski, A. V. Powell, *Chem. Mater.*, **14** (2002) 1201.

EXPERIMENTAL METHODS FOR SOLUBILITY AND PERMEABILITY STUDIES OF NOVEL CRYSTALLINE FORMS OF ACTIVE PHARMACEUTICAL INGREDIENTS

Anna Zep, Anna Rosa, Magdalena Ruszczak, Katarzyna Gibuła, Marta Zezula

Lukasiewicz – Industrial Chemistry Institute, Rydygiera 8, 01-793 Warsaw,

The therapeutic efficacy of drugs is determined by numerous factors, among which the solubility and permeability of the active pharmaceutical ingredient (API) play a crucial role. From a pharmaceutical perspective, an API is considered highly soluble when the highest single therapeutic dose is completely soluble in 250 mL of aqueous media within the pH range of 1.2–6.8 at $37 \pm 1^\circ\text{C}$. The permeability of an active substance through biological membranes is evaluated on the basis of pharmacokinetic studies determining the extent of drug absorption, including absolute bioavailability or mass-balance studies. The relationship between solubility and permeability constitutes the basis of the Biopharmaceutics Classification System (BCS), which categorizes APIs into four classes depending on their physicochemical and biopharmaceutical properties. It has been estimated that approximately 40–60% of commercially available APIs exhibit poor aqueous solubility, whereas up to 90% of newly developed compounds may belong to BCS classes II and IV [1, 2]. Therefore, improving the solubility and permeability of selected active substances remains one of the major challenges in contemporary pharmaceutical research.

Among the most commonly employed approaches for enhancing the solubility of active pharmaceutical ingredients (APIs) are chemical and physical modifications, including the development of novel crystalline and solid-state forms such as cocrystals, solvates, and other multicomponent systems [3, 4]. In this context, reliable analytical and experimental methods for the evaluation of solubility and biological permeability are of particular importance, as they enable comprehensive physicochemical and biopharmaceutical characterization of such materials.

Importantly, investigations of novel crystalline forms typically require the use of appropriately developed chromatographic methods, most commonly high-performance liquid chromatography (HPLC) or ultra-high-performance liquid chromatography (UPLC) coupled with UV–VIS detection. These techniques are essential for the assessment of chemical purity and quantitative determination of API content both during the preparation of crystalline forms and in subsequent solubility and permeability studies. Due to differences in physicochemical properties between APIs and cofomers, including polarity and pK_a values, the development of selective and optimized analytical procedures is often necessary. In addition, the developed methods must meet validation requirements such as sensitivity, linearity, precision, and accuracy, in accordance with ICH guidelines and the European Pharmacopoeia, ensuring their reliability for pharmaceutical applications.

This work presents an overview of selected methodologies used for the assessment of novel crystalline forms of APIs, with special emphasis on solubility determination and permeability evaluation across biological barriers, together with a discussion of their advantages, limitations, and applicability in pharmaceutical development.

A-29

Literature

- [1] EMA; guideline on the investigation of bioequivalence; CPMP/EWP/QWP/1401/98 Rev. 1; London, 20 January 2010.
- [2] ICH; M9 Biopharmaceutics Classification System-Based Biowaivers Guidance for Industry; May 2021.
- [3] A. Malaz, E. Yousef, V.R. Vangala, *Crys. Growth Des.*, **19** (2019) 7420.
- [4] Z. Wang, Qi Li, Qi An, L. Gong, S. Yang, B. Zhang, Bin Su, Dezhi Yang, Li Zhang, Yang Lu, Guanhua Du, (2023) Natural Products and Bio-prospecting.

CRYSTAL ENGINEERING OF BIOACTIVE ISOFLAVONES

**Anna Zep¹, Andrzej Trzepała¹, Anna Rosa¹, Katarzyna Gibuła¹,
Arkadiusz Ciesielski², Anna Sadocha², Kamila Pruszkowska²,
Michał K. Cyrański², Marta Zezula¹**

¹ *Lukasiewicz – Industrial Chemistry Institute, Rydygiera 8, 01-793 Warsaw,*

² *Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Pasteura 1, 02-093 Warsaw*

**e-mail: anna.zep@ichp.lukasiewicz.gov.pl*

The preparation of new crystalline forms of biologically active compounds is currently one of the most intensively explored directions in pharmaceutical solid-state chemistry. Modification of crystal structure may lead to significant changes in physicochemical properties, particularly solubility, dissolution rate and stability, without the covalent modification of the active molecule. Such approaches are especially important for compounds exhibiting promising biological activity but limited pharmaceutical applicability due to poor water solubility.

Isoflavones are an important class of naturally occurring compounds known for their various biological effects, including antioxidant, anti-inflammatory and chemoprotective activity [1]. Nevertheless, their practical use is still limited because of unfavorable physicochemical properties associated with low aqueous solubility and reduced bioavailability [2]. In this context, crystal engineering methods provide significant potential for the design of alternative solid-state forms with modified properties [3].

The present work focuses on the synthesis and solid-state investigation of selected bioactive isoflavone compounds and their novel crystalline forms. Efficient synthetic methodologies combined with crystal engineering strategies afforded a series of novel crystalline phases differing in supramolecular organization and intermolecular interactions. The obtained systems include hydrated and solvated phases, as well as multicomponent crystalline materials designed to modify physicochemical properties, particularly solubility-related behavior.

Special attention was paid to understanding the relationship between crystal structure, hydrogen-bonding motifs and physicochemical properties of the obtained materials. Structural characterization was performed using single-crystal and powder X-ray diffraction methods (SC-XRD, PXRD). Additional investigations included thermal analysis (DSC and TGA) and spectroscopic techniques (FTIR and Raman spectroscopy).

Preliminary studies indicate that modification of the solid-state architecture may significantly influence dissolution properties and stability of the investigated compounds.

The research was performed on the basis of cooperation agreement between Lukasiewicz Research Network – Industrial Chemistry Institute and Faculty of Chemistry, University of Warsaw.

Literature

- [1] A. Crozier, I. B. Jaganath, M. N. Clifford, *Nat. Prod. Rep.*, **26** (2009) 1001.
- [2] N. Mignet, J. Seguin, M. Ramos Romano, L. Brullé, Y. S. Touil, D. Scherman, M. Bessodes, G. G. Chabot, *Int. J. Pharm.*, **423** (2012) 69.
- [3] G. R. Desiraju, J. J. Vittal, A. Ramanan, *Crystal Engineering - a Textbook*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2011).

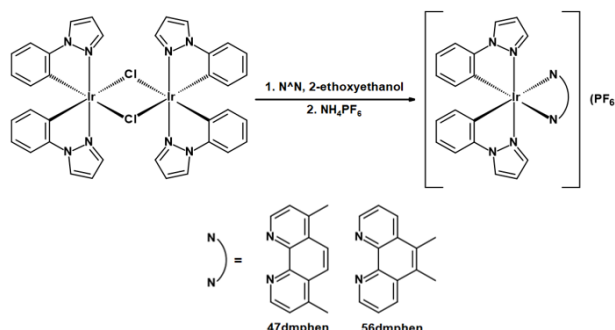
**BADANIA KRystalograficzne I Oddziaływań
Biomolekularnych Bis-Cyklometalowanych
Kompleksów Irydu(III) z Ligandami
1-Fenylo-1H-pirazolowymi i Dimetylowymi
Pochodnymi 1,10-Fenantroliny**

Waldemar Wysocki, Patryk Wójcik, Zbigniew Karczmarzyk, Anna Kamecka

Instytut Nauk Chemicznych, Uniwersytet w Siedlcach, ul. 3 Maja 54, 08-110 Siedlce

Kompleksy cyklometalowanego irydu(III) należą do intensywnie badanej grupy związków koordynacyjnych ze względu na ich interesujące właściwości fotofizyczne, wysoką trwałość chemiczną oraz potencjalne zastosowania w optoelektronice, bioobrazowaniu i chemii medycznej [1-3]. Szczególne znaczenie mają układy zawierające ligandy typu C^N oraz α-diiminowe ligandy pomocnicze, umożliwiające precyzyjne modyfikowanie właściwości emisyjnych i oddziaływań biomolekularnych.

W prezentowanym komunikacie przedstawiamy syntezę, struktury krystaliczne i badania oddziaływań biomolekularnych dwóch bis-cyklometalowanych kompleksów irydu(III) o wzorze ogólnym [Ir(ppz)₂(N^N)](PF₆), gdzie ppz oznacza 1-fenylo-1H-pirazol, natomiast N^N stanowią dimetylowe pochodne 1,10-fenantroliny: 4,7-dimetylo-1,10-fenantrolina (47dmphen) oraz 5,6-dimetylo-1,10-fenantrolina (56dmphen). Otrzymane związki scharakteryzowano metodami spektroskopowymi ¹H NMR, ³¹P NMR oraz UV–Vis.



Badania luminescencyjne wykazały szerokie pasma emisji w temperaturze pokojowej związane z przejściami typu MLCT, natomiast w temperaturze 77 K obserwowano intensywną emisję o charakterze ligandowym. Położenie pasm emisyjnych zależy od rodzaju zastosowanego liganda N^N, co wskazuje na istotny wpływ podstawienia metylowego na strukturę stanów wzbudzonych. Przeprowadzono również badania oddziaływań kompleksów z DNA metodą wypierania bromku etydyny. Wszystkie związki wykazywały umiarkowane oddziaływania interkalacyjne z DNA, przy czym największą wartość stałej wygaszania Sterna–Volmera uzyskano dla kompleksu zawierającego ligand 56dmphen.

Literatura

- [1] E. Bizzarri et al., *Coord. Chem. Rev.*, **373** (2018) 49.
- [2] A. Kapturkiewicz, A. Kamecka, *RSC Adv.*, **11** (2021) 29308.
- [3] R. K. Gupta et al., *Inorg. Chem.*, **52** (2013) 3687.

PROMIENIOWANIE A KRYSTALIZACJA: UKŁAD KWAS TRITIOCYJANUROWY-PIRYDAZYNA

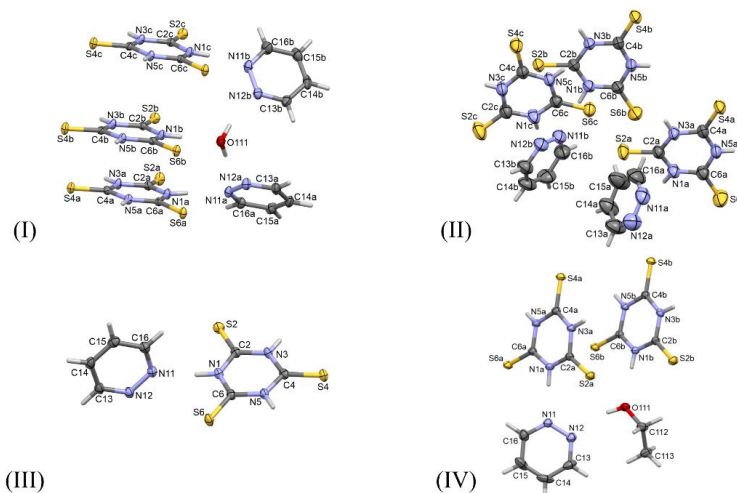
Marcin Właźlak^{1,2}, Kinga Wzgarda-Raj¹, Marcin Palusiak¹

¹ Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki, Pomorska 163/165, 90-149 Łódź

² Szkoła Doktorska BioMedChem UŁ i Instytutów PAN w Łodzi, Matejki 21/23, 90-231 Łódź

W ostatnich latach coraz większą uwagę poświęca się wpływowi promieniowania elektromagnetycznego na proces krystalizacji. Wcześniejsze badania wykazały, że promieniowanie ultrafioletowe (UV) może znacząco wpływać na morfologię kryształów oraz ich strukturę wewnętrzną, sprzyjając wzrostowi większych kryształów di-tiomocznika z chlorkiem kadmu [1] oraz wywołując zmiany strukturalne w sieci krystalicznej kompleksów kobalt–tiomocznik [2]. Wyniki te wskazują, że promieniowanie UV może być czynnikiem mającym znaczący wpływ na końcowe produkty procesu krystalizacji.

Przeprowadzone badania miały na celu określenie wpływu promieniowania elektromagnetycznego na proces krystalizacji wieloskładnikowych układów zawierających kwas tritiocyjjanurowy (TTCA) oraz pirydazynę. Krystalizacje przeprowadzone w różnych warunkach oświetlenia doprowadziły do otrzymania czterech kryształów wieloskładnikowych, które nie zostały wcześniej zdeponowane w Krystalograficznej Bazie Danych z Cambridge (CSD) [3] (rys. 1).



Rys. 1. Schemat uzyskanych kryształów wieloskładnikowych kwasu tritiocyjjanurowego z pirydazyną, uzyskanych w warunkach ciemni (I,II), pod wpływem światła widzialnego (III) oraz promieniowania UV (IV).

Literatura

- [1] L. E. Trujillo, E. A. Chavez Urbiola, F. Legorreta, I. R. Chavez Urbiola, F. J. Willars-Rodriguez, R. Ramirez-Bon, M. Ramirez-Cardona, *J. Cryst. Growth*, **478** (2017) 140–145.
- [2] L. E. Trujillo Villanueva, F. Legorreta García, F. Pérez Moreno, M. Ramírez Cardona, E. A. Chávez Urbiola, *Crystals*, **11** (2021) 473.
- [3] C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, *Acta Cryst. B*, **72** (2016) 171–179.

STRUKTURA KRystaliczna METYLOWEJ POCHODNEJ 7-AZAINDOLO-3-KARBOALDEHYDU

**Ksenia Szmigiel-Bakalarz¹, Paul Sicher², Oliver Oeckler²,
Barbara Morzyk-Ociepa¹**

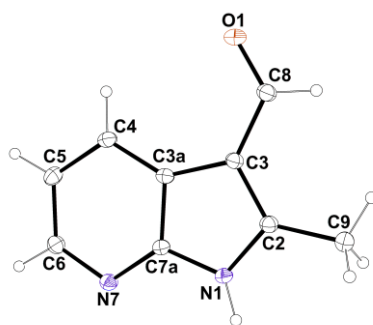
¹ Instytut Chemii, Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych, Uniwersytet Jana Długosza w Częstochowie, Armii Krajowej 13/15, 42-200 Częstochowa, Polska

² Instytut Chemii Nieorganicznej i Krystalografii, Wydział Chemii, Uniwersytet w Lipsku, Johannisallee 29, D-04103 Lipsk, Niemcy

Pochodne 7-azaindolo-3-karboaldehydu stanowią obiecującą grupę ligandów do syntezy związków kompleksowych o potencjalnej aktywności przeciwnowotworowej [1]. Dotychczas wyznaczono struktury krystaliczne związku macierzystego [2] oraz jego chlorowanej pochodnej [3].

W niniejszej pracy otrzymano monokryształy 2-metylo-1H-pirololo[2,3-b]pirydyno-3-karboaldehydu (2MeL). Analiza struktury krystalicznej wykazała, że związek krystalizuje w układzie jednoskośnym, w grupie przestrzennej $C2/c$, o parametrach komórki elementarnej: $a = 17.6831(16)$, $b = 6.2353(8)$, $c = 14.1866(13)$ Å, $\beta = 102.634(7)^\circ$, $V = 1526.3(3)$ Å³, $Z = 8$.

W strukturze krystalicznej cząsteczki tworzą centrosymetryczne dimery połączone podwójnymi wiązaniami wodorowymi N–H···N pomiędzy pierścieniami pirolowymi i pirydynowymi, analogicznie do struktury liganda niepodstawionego [2] oraz jego chlorowanej pochodnej [3]. Strukturę krystaliczną stabilizują dodatkowo oddziaływania międzycząsteczkowe typu C–H···O oraz π ··· π pomiędzy pierścieniami pirydynowymi sąsiednich cząsteczek.



Rys. 1. Struktura molekularna 2MeL z elipsoidami przemieszczeń termicznych.

Praca finansowana w ramach mikrograntu Zadanie Z3 Mikrogranty (konkurs I/2025) programu RID „Program Rozwoju Badań Naukowych, Transferu Innowacji, Umiejdzynarodowienia i Kształcenia w UJD”.

Literatura

- [1] K. Szmigiel-Bakalarz, D. Kłopotowska, J. Wietrzyk, M. Malik, B. Morzyk-Ociepa, *Molecules*, **29** (2024) 5909.
- [2] B. Morzyk-Ociepa, K. Szmigiel, I. Turowska-Tyrk, D. Michalska, *J. Mol. Struct.*, **1128** (2017) 186–194.
- [3] W. Mucha, J. Bąkiewicz, M. Malik, B. Morzyk-Ociepa, *Crystals* **14** (2024) 631.

POWIĄZANIE ŁAMANIA SYMETRII CZĄSTECZKI KARBAMAZEPINY Z TOPOLOGIĄ SŁABYCH ODDZIAŁYWAŃ MIĘDZYCZĄSTECZKOWYCH W ODMIANACH POLIMORFICZNYCH LEKU

Izabela Madura¹, Christopher Kingsbury², Oliwia Strzechowska¹

¹ Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska; Stanisława Noakowskiego 3,
00-664 Warszawa

² The Cambridge Crystallographic Data Centre; 12 Union Road Cambridge CB2 1EZ
United Kingdom

Karbamazepina jest organicznym, aromatycznym związkiem chemicznym stosowanym powszechnie jako lek przeciwpadaczkowy oraz stabilizujący nastrój przy leczeniu choroby afektywnej dwubiegunowej. Substancja ta sprawia jednak problemy w formułacjach farmaceutycznych ze względu na niską rozpuszczalność w wodzie oraz polimorfizm. Obecnie wyodrębnia się 5 odmian polimorficznych tego leku (od I do V) [1], które różnią się stopniem trwałości – od struktur metastabilnych do najbardziej stabilnej termodynamicznie formy III.

W ramach prowadzonych badań przeanalizowano bazę danych Cambridge Structural Database (CSD), biorąc pod uwagę 165 cząsteczek karbamazepiny. Wykorzystano zaawansowane narzędzia obliczeniowe i analityczne, takie jak CSD Python API, CSD Mercury, RStudio oraz metody oparte na teorii grup i teorii grafów. Do ilustrowania zjawiska łamania symetrii rozważanych cząsteczek zastosowano „diagramy Mondriana”. Podjęto próbę zbadania korelacji subtelnych odchyień od docelowej symetrii (analizując m.in. parametr A2 opisujący skręcanie/rotację oraz B1 opisujący rozciąganie/ściskanie) z typem, liczbą oraz wpływem wiązań wodorowych, a także oddziaływań aromatycznych występujących we wszystkich formach kryształów.

Chociaż wnioski z rozważanych korelacji nie są na ten moment jednoznaczne dla wszystkich układów, to w przypadku porównywania odmian polimorficznych karbamazepiny zauważono istotną zależność. Wykazano, że dla termodynamicznie stabilnej formy (III CBMZPN10) deformacja cząsteczki umożliwia stabilizowanie charakterystycznej topologii warstwy typu plaster miodu jedynie poprzez wiązania aromatyczne. Znajomość tego typu zależności może być w przyszłości wysoce pomocna w ustalaniu najbardziej prawdopodobnych struktur krystalicznych przewidywanych teoretycznie z wykorzystaniem metod Crystal Structure Prediction (CSP).

Literatura

- [1] Amy V. Hall, Aurora J. Cruz-Cabeza, Jonathan W. Steed, What Has Carbamazepine Taught Crystal Engineers? *Crystal Growth & Design*, **24** (2024) 7342–7360. DOI: 10.1021/acs.cgd.4c00555

ROLA KATIONU ORGANICZNEGO W STRUKTURZE ELEKTRONOWEJ HYBRYDOWEGO CHLORKU CYNY(IV): ANALIZA DFT I KONTEKST LITERATUROWY

Amelia Steżalska^{1,2}, Oleksandr Korolevych¹, Tamara J. Bednarchuk¹

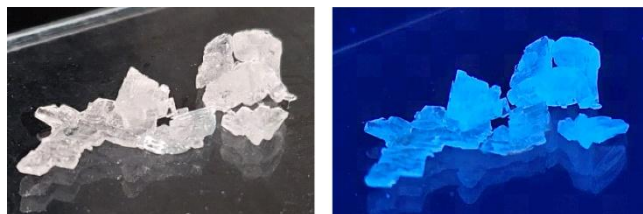
¹ Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, ul. Okólna 2,
50-422 Wrocław

² Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski, ul. F. Joliot Curie 14, 50-383 Wrocław

Imidazol i jego pochodne są powszechnie wykorzystywane w syntezie organiczno-nieorganicznych hybrydowych halogenków metali ze względu na możliwość kształtowania ich właściwości strukturalnych i fizykochemicznych [1,2]. W przypadku hybrydowych chlorków cyny(IV) emisja w temperaturze pokojowej zazwyczaj wymaga domieszkowania jonami o konfiguracji walencyjnej ns^2 , takimi jak Bi^{3+} , Sb^{3+} czy Te^{4+} [3,4].

Otrzymane kryształy $(C_4H_7N_2O)_2SnCl_6$ (gdzie $C_4H_7N_2O$ to kation 4(5)-(hydroksymetylo)imidazoliowy), wykazują jednak niebieską emisję w temperaturze pokojowej (Rys. 1) bez konieczności stosowania aktywatorów, co sugeruje istotną rolę części organicznej w kształtowaniu właściwości optycznych.

Strukturę związku scharakteryzowano metodami monokrystalicznej (SXRD) i proszkowej (PXRD) dyfrakcji rentgenowskiej, natomiast oddziaływania międzycząsteczkowe przeanalizowano w oparciu o powierzchnię Hirshfelda. W celu zbadania wpływu kationu organicznego na strukturę elektronową przeprowadzono obliczenia DFT oraz pomiary absorpcji UV–Vis.



Rys. 1. Kryształy $(C_4H_7N_2O)_2SnCl_6$ w świetle dziennym (po lewej) oraz w świetle UV (po prawej).

Literatura

- [1] D. Drozdowski, M. Maczka, K. Fedoruk, A. Sieradzki, A. Kabanski, A. Gagor, *J. Mater. Chem. C*, **11** (2023) 4907-4915.
- [2] Y. Wang, T. Zhou, J. Chen, H. Qin, J. Wu, Z. Qin, H. Gu, Z. Gao, R. Liu, T. Ye, Y. Yang, F. Sun, T. Zhang, J. Hou, Y. Fang, Y. He, Y. Sun, M. Wang, L. Wang, H. Chen, W. Jiang, *Chem. Eng. J.*, **515** (2025) 163495.
- [3] M. Ren, Y. Wang, S. Zhang, J. Yao, B. Zou, R. Zeng, *Inorg. Chem.*, **63** (2024) 24410–24420.
- [4] L. Zhou, S. Zhou, X. Liu, J. Ma, T. Zhang, K. Li, Y. Chang, W. Shen, M. Li, R. He, *Inorg. Chem.*, **63** (2024) 10335–10345.

**[W(CN)₆(DAA)]²⁻ – NOWY, HETEROLEPTCZNY BLOK
BUDULCOWY OPARTY NA LIGANDACH CYJANOWYCH
I DIAMINOACETYLENIE – OTRZYMYWANIE I SYNTEZA
NOWYCH POŁĄCZEŃ HETEROMETALICZNYCH**

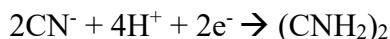
Monika Sternal^{1,2}, Maciej Hodorowicz¹, Janusz Szklarzewicz¹, Anna Jurowska¹

¹ *Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Zespół Chemii Koordynacyjnej
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków, Polska*

² *Uniwersytet Jagielloński, Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych
ul. Prof. St. Łojasiewicza 11, 30-348 Kraków, Polska*

W 1988 roku opracowano metodę syntezy heteroleptycznego kompleksu (PPh₄)₂[W(CN)₆(bpy)]·4H₂O poprzez termiczny rozkład homoleptycznego związku (bpyH)₃(H₃O)[W(CN)₈]·H₂O [1]. W trakcie procesu dwa ligandy cyjankowe zostają zastąpione przez obojętny, dwukleszczowy ligand 2,2'-bipirydynę (bpy). Analiza widm IR surowego produktu wskazuje na obecność oczekiwanego kompleksu, jednak obserwowane dodatkowe pasma przy około 1700 oraz 1559 cm⁻¹ sugerują obecność produktów ubocznych niewynikających ze struktury związku docelowego. Wielokrotna rekrytalizacja z układu MeOH/H₂O prowadzi do rozdziału mieszaniny na dwa typy kryształów: ciemnofioletowe kryształy (PPh₄)₂[W(CN)₆(bpy)]·4H₂O oraz niemal bezbarwne kryształy nowego kompleksu (PPh₄)₂[W(CN)₆(daa)]·2H₂O, gdzie daa oznacza ligand diaminoacetylenowy (H₂N-C≡C-NH₂). Analizy ilościowe wykazały, że zawartość kompleksu z ligandem daa w surowym produkcie może osiągać nawet około 50% [2]. Strukturę badanego anionu przedstawiono na Rys. 1a.

Proces powstawania liganda daa monitorowano metodą spektroskopii IR in situ, rejestrując widma próbek pobieranych z glicerynowego roztworu reakcyjnego co 10 sekund podczas termicznego rozkładu związku wyjściowego. Zastosowanie gliceryny umożliwiło uzyskanie lepszej kontroli oraz powtarzalności procesu, pomimo obecności pasm pochodzących od rozpuszczalnika. Postulowany mechanizm tworzenia liganda daa opiera się na reakcji:

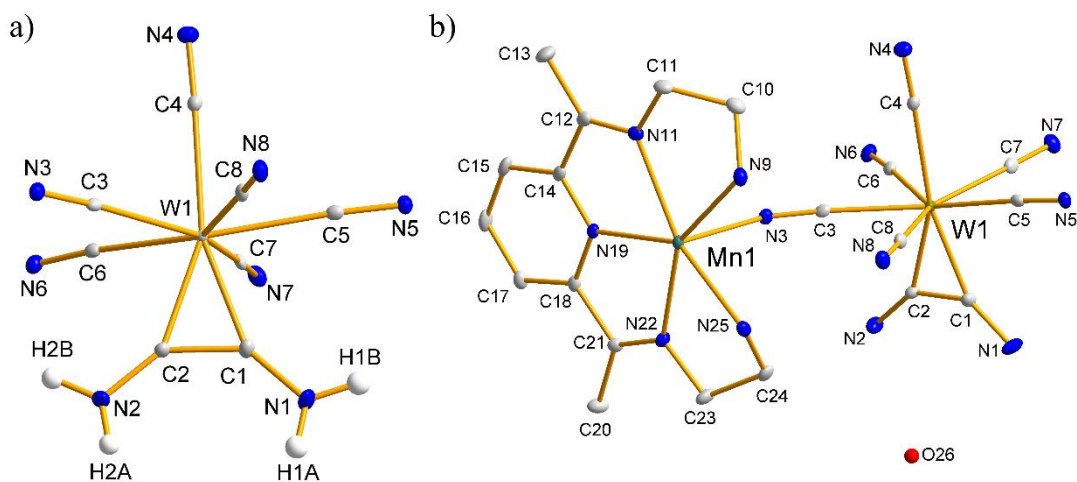


Otrzymany anion [W(CN)₆(daa)]²⁻ stanowi pierwszy dotychczas opisany przykład kompleksu zawierającego skoordynowany ligand diaminoacetylenowy [2]. Szczególnie interesujący jest fakt, że ligand ten powstaje in situ podczas rozkładu termicznego, a nie jest wprowadzany jako substrat reakcji. Optymalizacja procesu rozdziału mieszaniny produktów umożliwiła wyizolowanie obu czystych związków: (PPh₄)₂[W(CN)₆(bpy)]·4H₂O oraz (PPh₄)₂[W(CN)₆(daa)]·2H₂O, co umożliwiło prace nad wykorzystaniem anionu [W(CN)₆(daa)]²⁻ jako nowego bloku budulcowego do syntezy wielordzeniowych materiałów molekularnych.

W dalszych badaniach otrzymano nowy związek koordynacyjny [Mn(ZS)][W(CN)₆(daa)]·0.75H₂O (1), gdzie ZS oznacza zasadę Schiffa otrzymaną w reakcji kondensacji 2,6-diacetylopirydyny z etylenodiaminą (1:2). Asymetryczną część komórki elementarnej związku 1 przedstawiono na Rys. 1b. Analiza strukturalna wykazała, że związek 1 tworzy jednowymiarową architekturę zbudowaną

A-36

z zygawkowatych łańcuchów typu $-\text{Mn}-\text{N}\equiv\text{C}-\text{W}-\text{C}\equiv\text{N}-\text{Mn}-$, stabilizowanych oddziaływaniami międzycząsteczkowymi pomiędzy sąsiednimi łańcuchami. Analiza geometrii koordynacyjnej z wykorzystaniem programu SHAPE wskazuje, że kation Mn(II) przyjmuje geometrię lekko zniekształconej bipiramidy pentagonalnej (PBPY-7), natomiast centrum wolframu charakteryzuje się geometrią lekko zniekształconego trójkątnego dwunastościanu (TDD-8). Dla otrzymanego związku oraz substratu $[\text{Mn}(\text{ZS})]\text{Cl}_2\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ przeprowadzono również badania właściwości fizykochemicznych.



Rys. 1. (a) Struktura anionu $[\text{W}(\text{CN})_6(\text{daa})]^{2-}$ w związku 1; (b) Asymetryczna część komórki elementarnej związku 1 z przyjętym schematem numeracji atomów. Atomy wodoru w części (b) pominięto dla przejrzystości rysunku. Wszystkie widoczne atomy przedstawiono za pomocą elipsoid termicznych na 30% poziomie prawdopodobieństwa.

Literatura

- [1] J. Szklarzewicz, A. Samotus, *Transition Metal Chemistry*, **13**(1) (1988) 69–71.
- [2] J. Szklarzewicz, M. Hodorowicz, A. Jurowska, *New Journal of Chemistry*, **48** (2024) 13196–13205.

HYDROGEN-BOND MOTIFS IN SALICYLATE SALTS OF IMIDAZOLE DERIVATIVES: A CRYSTALLOGRAPHIC AND HIRSHFELD SURFACE STUDY

**Klaudia Stachowiak¹, Hubert Mulczyński², Sylwia Zięba¹, Adam Mizera¹,
Andrzej Gzella³, Andrzej Łapiński¹**

¹ *Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Sciences, Mariana
Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznan, Poland*

² *Department of Materials Engineering and Technical Physics, Poznań University of
Technology, Jacka Rychlewskiego 1, 61-131 Poznan, Poland*

³ *Department of Organic Chemistry, Poznan University of Medical Sciences,
Rokietnicka 3, 60-806 Poznan, Poland*

Proton-conducting materials based on organic salts that form hydrogen bonds are receiving increasing attention for their potential applications in electrochemical devices, such as fuel cells and sensors [1,2]. Proton transport in such systems is closely linked to the formation of extensive hydrogen-bond networks, for example, via the Grotthuss mechanism [3,4].

In this communication, we present comparative crystallographic, spectroscopic, and theoretical studies of three organic salts, imidazolium salicylate (ImiSal), benzimidazolium salicylate (BenSal), and 2-methylimidazolium salicylate (2-MeImiSal). The compounds were obtained from solutions containing salicylic acid and bases in appropriate solvents. The substrates were dissolved separately, and the solutions were then combined and stirred on a magnetic stirrer. The resulting solutions were allowed to crystallize, and the crystals were washed with a suitable solvent and left to dry. Single-crystal X-ray diffraction revealed that the salts crystallize in different space groups: *Pbca* (ImiSal) [5], *P2₁/c* (BenSal), and *Pbcn* (2-MeImiSal).

Hydrogen-bond motifs were analyzed and classified using the graph-set formalism introduced by Etter et al. [6]. Across all structures, the salicylate anion exhibits a characteristic intramolecular S(6) hydrogen-bond motif. Distinct hydrogen-bond motifs were observed depending on the cation. The imidazolium salt forms a helical $C_2^2(8)$ chain motif [5], whereas the benzimidazolium salt is characterized by an $R_4^4(16)$ ring motif, consistent with previously reported benzimidazole–salicylate systems by Amudha et al. [7]. In contrast, the 2-methylimidazolium salt exhibits a chain-like hydrogen-bonded network with a zigzag topology [8].

Hirshfeld surface analysis was performed on all structures. Differences in fingerprint plots reflect variations in intermolecular contacts and packing arrangements. Infrared spectroscopy confirmed proton transfer from salicylic acid to the respective bases, as indicated by characteristic shifts in vibrational bands. This is consistent with the formation of ionic hydrogen-bonded systems. QTAIM analysis was used to characterize hydrogen bonds by electron density at bond critical points. The results indicate the presence of moderate to strong hydrogen bonds in all structures.

The results show that subtle changes in the base's molecular structure significantly influence hydrogen-bond topology, crystal symmetry, and supramolecular organization. These findings deepen understanding of structure–property relationships

in hydrogen-bonded organic salts and inform the design of proton-conducting materials based on salicylate systems.

Literature

- [1] S. Zięba, A. T. Dubis, A. K. Gzella, P. Ławniczak, K. Pogorzelec-Glaser, A. Łapiński, *PCCP*, **21** (2019) 17152–17162.
- [2] J. Tollefson, *Nature*, **464** (2010) 1262–1264.
- [3] S. Zięba, A. Dubis, P. Ławniczak, A. Gzella, , K. Pogorzelec-Glaser, A. Łapiński, *Electrochimica Acta*, **306** (2019) 575–589.
- [4] S. Cukierman, *Biochem. Biophys Acta*, **1751** (2006) 876–885.
- [5] S. Zięba, A. T. Dubis, M. Rusek, A. Katrusiak, A. K. Gzella, A. Łapiński, *PCCP*, **21** (2019) 17152–17162.
- [6] M. C. Etter, *Acc. Chem. Res.*, **23** (1990) 120–126.
- [7] M. Amudha, P. P. Kumar, G. Chakkaravarthi, *Acta Cryst.*, **71** (2015) 794–795.
- [8] I. C. B. Martins, D. Al.-Sabbagh, K. Meyer, M. Maiwald, G. Scholz, F., Emmerling, *Molecules*, **24** (2019) 4144.

ALLYL DERIVATIVES OF PYRIDYL-SUBSTITUTED HETEROCYCLES AS VERSATILE LIGANDS IN THE DESIGN OF NOVEL OLEFIN-COPPER(I) COORDINATION COMPOUNDS

Yurii Slyvka*¹, Evgeny Goreshnik²

¹ Ivan Franko National University of Lviv, 79005 Lviv, Ukraine

² Jožef Stefan Institute, Jamova 39, SI-1000 Ljubljana, Slovenia

*e-mail: yurii.slyvka@lnu.edu.ua

Pyridyl-substituted heterocycles represent an important class of ligands due to their electronic flexibility, their versatile coordination ability, and structural tunability. Their capacity to act as multifunctional ligands makes them highly promising for the design of novel metal complexes with tailored properties. The incorporation of an allyl substituent into the mentioned synthons may significantly change the coordination abilities of the ligands due to the directed metal-olefin bonding and significantly influence the optical properties of the resulting coordination compounds [1]. The aim of this work is to develop novel Cu(I) π,σ -coordination compounds based on S- and N-derivatives of pyridyl-substituted triazoles, pseudothiohydantoins and tetrazoles (Fig. 1).

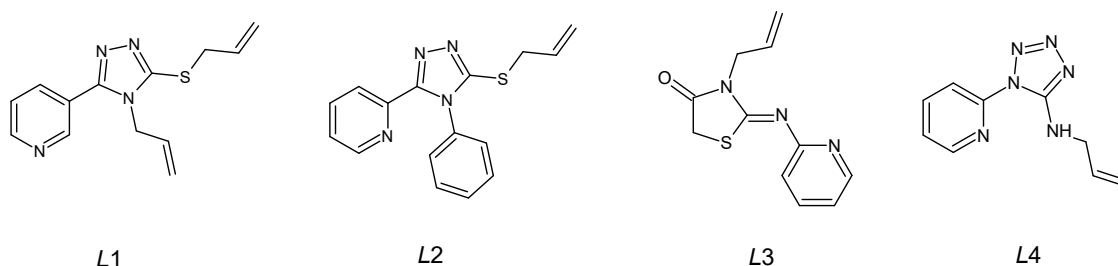


Fig. 1. Allyl derivatives of pyridyl-substituted heterocycles used for olefin-copper(I) complex preparation.

Crystals of the corresponding copper(I) π,σ -coordination compounds were obtained under the conditions of the alternating-current electrochemical technique [1-2] starting from the acetonitrile or alcohol solution of *L* and the corresponding copper(II) salts on copper electrodes. Diffraction data for the complexes were collected on Agilent Gemini A and XtaLAB Synergy four-circle diffractometers using Mo $K\alpha$ radiation ($\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$) or Cu $K\alpha$ radiation ($\lambda = 1.54184 \text{ \AA}$).

Ligand *L1* with CuCl forms a mixed-valence coordination compound $[\text{Cu}^{\text{I}}_2(\text{L1})_2(\text{H}_2\text{O})_2\text{Cu}^{\text{II}}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{NO}_3)_2](\text{NO}_3)_2$. In its crystal structure, organic molecule acts as a chelate-bridging ligand, being attached to two Cu(I) ions through the allylthio group and two triazole atoms, forming $\{\text{Cu}_2(\text{L1})_2\}$ subunits. The latter are interconnected by $\{\text{Cu}^{\text{II}}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{NO}_3)_2\}$ subunits through a pyridyl bridge into the cationic infinite chains (Fig. 2). π -Bonded allyl group in complex is disordered over two sites with an occupancy ratio of 0.63(2) : 0.37(2).

A-38

In the crystal structure of $\text{Cu}(\text{NH}_2\text{SO}_3)$ π, σ -coordination compounds with L2, there are four crystallographically independent Cu(I) ions. Two of them (Cu1 and Cu2) form a dimeric $\{\text{Cu}_2(\text{L2})_2\}$ subunit, organized by coordination of two organic ligands with allylthio groups and two triazole atoms. The other two (Cu3 and Cu4) metal ions adopt a trigonal planar arrangement composed of a pyridyl N atom and sulfamate anions. Two of the four crystallographically independent anions act as a bridge connecting organometallic moieties into a 1D-coordination polymer.

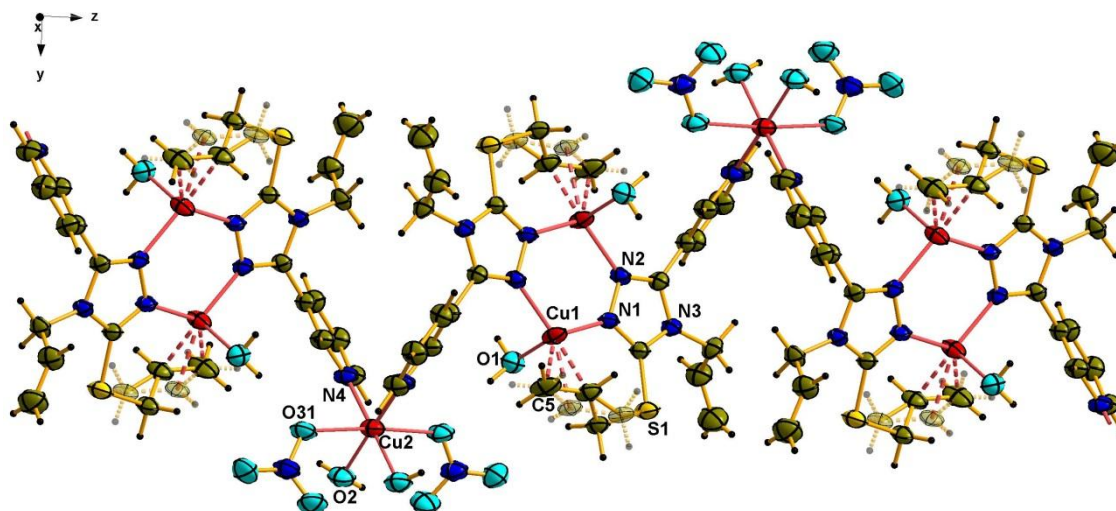


Fig. 2. Cationic chain in the crystal structure of mixed-valence $\text{Cu}^{\text{I}}/\text{Cu}^{\text{II}}$ coordination compound with ligand L1. One of the disordered positions of π -bonded allyl group with lower S.O.F. is shown in semi-transparent mode.

Pseudothiohydantoin ligand L3 with ionic copper salts forms crystalline compounds with two crystallographically independent Cu(I) ions forming isolated dimeric $[\text{Cu}_2(\text{L3})_2]$ units. Chelate bridging organic molecule fully realizes its coordination abilities, being attached to the metal ions through the C=C bond of the allyl group, imine N atom, and the pyridyl N atom. The apical position of the trigonal-pyramidal Cu(I) surrounding depending on the anion type, is occupied by a water molecule or atoms of the corresponding anions. Ligand L4 despite the presence in its structure of four donor N atoms, prefer to bind with copper(I) only by allylic C=C bond and one tetrazole N atom in a chelate mode. Specific organization of the obtained novel olefin-copper(I) coordination compounds has been proven the key to achieving large optical nonlinearity.

Acknowledgment

Yu. Slyvka is grateful for financial support to the President of Ukraine Grant administered by the National Research Foundation of Ukraine within the project No. 2025.02/0041 "Design and synthesis of olefin-copper complexes based on allyl derivatives of N-containing heterocycles for nonlinear optical devices".

Literature

- [1] A. M. Fedko, Yu. I. Slyvka, E. A. Goreshnik, J. Jędryka, P. Rakus, D. Morozov, *J. Mol. Struct.*, 1319 (2025) 139552.
- [2] Yu. I. Slyvka, O. V. Pavlyuk, M. Yu. Luk'yanov, M. G. Mys'kiv, *Ukraine Patent UA 118819*, Bull. № 16 (2017).

CRYSTAL STRUCTURES OF DIAMINE DERIVATIVES OF TETRACYANOQUINODIMETHANE AND TETRACYANOETHYLENE

Anna Sadocha¹, Maciej Woszczyk^{1,2}, Michał K. Cyrański¹, Arkadiusz Ciesielski¹

¹ *University of Warsaw, Faculty of Chemistry, Pasteura 1 02-093 Warsaw*

² *Institute of Organic Chemistry Polish Academy of Sciences, Kasprzaka 44/52,
01-224 Warsaw*

Tetracyanoquinodimethane (*TCNQ*) and tetracyanoethylene (*TCNE*) are compounds that have attracted significant attention due to their physicochemical properties and their ability to form a wide range of crystal structures. In reactions with metal iodides, metals, or organic cations they are readily reduced to form radical anions (*TCNQ^{•-}* and *TCNE^{•-}*) [1,2], thereby enabling the formation of charge-transfer complexes. Consequently, they are considered promising candidates for semiconductor applications [3].

TCNQ and *TCNE* readily undergo reactions with amines, most commonly leading to the substitution of two nitrile groups (located on the same side of the ring or double bond) by amino groups [4,5]. In reactions involving diamines, ring formation occurs. Diamine derivatives of *TCNQ* and *TCNE* may exhibit fluorescent properties [6].

In the present study, we obtained and determined the crystal structure of a complex comprising a novel *TCNQ* derivative (*EtdA-TCNQ^{•-}*) together with ethylenediamine and 1,4,7,10,13,16-hexaoxacyclooctadecane (18-Crown-6) molecules. The new derivative was formed via substitution of two nitrile groups of *TCNQ* by an ethylenediamine molecule, resulting in the formation of a five-membered ring. The derivative contains a delocalized negative charge, whereas the positive charge is localized on one of the amino groups of the ethylenediamine moiety. The compound crystallizes in the *Cc* space group. The *EtdA-TCNQ^{•-}* molecules are oriented relative to one another at an angle of approximately 44° and interact through hydrogen bonds formed between the *N-H...N* atoms belonging to the five-membered ring. Minor disorder is observed within the ethylenediamine molecule.

A new *TCNE* derivative (*TCNE-EtdA*) was also obtained and its crystal structure was determined. The compound crystallizes in the *C2/c* space group. The *TCNE-EtdA* molecules are coplanar and interact through hydrogen bonding between the *N-H* group of five-membered ring and the nitrogen atom of the nitrile group. Disorder is present within the *TCNE-EtdA* molecules.

Literature

- [1] L. R. Melby, R.J. Harder, W. R. Hertler, W. Mahler, R. E. Benson, W. E. Mochel, *J. Am. Chem. Soc.*, **84** (1962) 3374.
- [2] O. Webster, W. Mahler, R. Benson, *J. Am. Chem. Soc.*, **84** (1962) 3678.
- [3] J. Zhang, W. Xu, P. Sheng, G. Zhao, D. Zhu, *J. Am. Chem. Soc.*, **50** (2017) 1654.
- [4] P. Gangopadhyay, S. Sharma, A. J. Rao, D. N. Rao, S. Cohen, I. Agranat, T. P. Radhakrishnan, *Chem. Mater.*, **11** (1999) 466.
- [5] E. Ivanova, M. Osipova, Y. Kadyrov, S. Karpov, S. Markova, E. Zazhivihina, L. Umanova, T. Vasilieva, Y. Mitrasov, Y. Smolkina, *Molecules*, **29** (2024) 4727.
- [6] A. Syed, H. Battula, S. Mishra, S. Jayanty, *ACS Omega*, **6** (2021) 3090.

SUPERSILNE WIĄZANIA WODOROWE W POCHODNYCH TIOMOCZNIKA

Aleksandra Rydz, Marcin Palusiak

*Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki, Pomorska 163/165,
90-236 Łódź*

Tiomocznik to interesujący związek organiczny - pochodna mocznika, w której atom tlenu zastąpiony jest atomem siarki. Obecność grup aminowych oraz atomu siarki sprawia, że cząsteczka ta jest doskonałym modelem do badania natury wiązań chemicznych oraz stabilizujących interakcji w układach niekowalencyjnych. Tiomocznik może tworzyć różne formy krystaliczne i agregaty cząsteczkowe (dimery, trimery, tetramery), w których wiązania wodorowe odgrywają zasadniczą rolę w utrzymaniu stabilności struktury.

Szczególne znaczenie ma analiza wpływu utlenienia tiomocznika na jego właściwości chemiczne. Dodanie atomów tlenu do struktury cząsteczki prowadzi do zmian w rozkładzie gęstości elektronowej, a tym samym do modyfikacji charakteru wiązań C-S. Zmiana ta może wpływać nie tylko na właściwości wewnętrzcząsteczkowe, ale także na sposób, w jaki cząsteczki wchodzą w interakcje między sobą. Zastosowanie podejścia wielociałowego umożliwia z kolei ocenę nieliniowych efektów energetycznych, które nie wynikają bezpośrednio z sumy oddziaływań w parach atomów, lecz są efektem oddziaływań pomiędzy większą liczbą cząsteczek – jest to efekt nieaddytywny.

W niniejszej analizie podjęto próbę kompleksowego zbadania właściwości strukturalnych, topologicznych i energetycznych układów cząsteczek tiomocznika i jego utlenionego analogu. Wykorzystano w tym celu metody oparte na teorii funkcjonału gęstości (DFT) Ponadto zastosowano teorię Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM), pozwalającą na ilościowy opis natury wiązań chemicznych. Analizowano parametry topologiczne, takie jak gęstość elektronowa w punktach krytycznych wiązań (ρ_{BCP}), laplasjan gęstości elektronowej ($\nabla^2\rho_{BCP}$) i indeks delokalizacji (DI), które umożliwiają precyzyjne określenie charakteru badanych oddziaływań.

Literatura

- [1] Z. S. Derewenda, C-H Groups as Donors in Hydrogen Bonds: A Historical Overview and Occurrence in Proteins and Nucleic Acids. *International Journal of Molecular Sciences*, **24**(17) (2023) 13165.
- [2] G. Gilli, P. Gilli, The Nature of the Hydrogen Bond: Outline of a Comprehensive Hydrogen Bond Theory. Oxford University Press, Oxford 2009, s. 33–38.
- [3] M. Domagała, S. Simon, M. Palusiak, Resonance-Assisted Hydrogen Bond- Revisiting the Original Concept in the Context of Its Criticism in the Literature. *International Journal of Molecular Sciences* **23** (2022) 233.
- [4] J. B. Foresman, Æ. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Gaussian Inc., Pittsburgh 1996, s. 12–18, 45–52. R. F. W. Bader, Atoms in Molecules: A Quantum Theory. Oxford University Press, Oxford 1990, s. 41–55.
- [5] P. S. V. Kumar, Bader's Theory of Atoms in Molecules (AIM) and its Applications to Chemical Bonding. *Journal of Chemical Sciences*, **128**(10) (2016) 1527–1536.

NEW CRYSTALLINE FORMS OF SULFASALAZINE WITH ENHANCED SOLUBILITY

**Magdalena Ruszczak, Paulina Nieścior-Browińska, Katarzyna Gibuła,
Anna Zep, Marta Zezula**

Lukasiewicz – Industrial Chemistry Institute, Rydygiera 8, 01-793 Warsaw

Sulfasalazine (SLZ) is a well-known anti-inflammatory drug used in the treatment of rheumatoid arthritis [1] and gastrointestinal disorders such as ulcerative colitis and Crohn's disease [2]. It has also been demonstrated that, through inhibition of the cystine/glutamate antiporter (χ_c^-) and suppression of the nuclear transcription factor NF- κ B activation, sulfasalazine exerts pronounced cytotoxic effects against cancer cells [3-5]. Unfortunately, the therapeutic application of sulfasalazine is limited by its low bioavailability (approximately 10–30% following oral administration) [1]. Due to its poor solubility and low permeability, this compound is classified as a Class IV drug according to the Biopharmaceutics Classification System (BCS) [6-7]. As a consequence of its limited bioavailability, effective therapeutic use of sulfasalazine requires administration of high doses (e.g., 1–3 g daily in patients with rheumatoid arthritis [1]), which results in numerous adverse effects that significantly reduce patients' quality of life. Therefore, considerable efforts are currently focused on the development of novel crystal forms of sulfasalazine exhibiting improved solubility and enhanced permeability leading to increased bioavailability.

Herein, we present selected newly synthesized co-crystals of Sulfasalazine with cofomers containing *N*-heterocyclic aromatic unit. New multicomponent crystalline solids were identified by solvent-drop grinding approach and isolated afterwards by slow evaporation methods and characterized by powder X-ray diffraction, thermal analysis, infrared spectroscopy, and solubility studies. The presented results demonstrate the potential of crystal engineering strategies in the design of new solid forms of Active Pharmaceutical Ingredients with improved solubility.

Literature

- [1] G.L. Plosker et al., *Drugs*, **65**(13) (2005) 1825.
- [2] Y.Q. Zhong et al., *World J Gastroenterol*, **11**(28) (2005) 4435.
- [3] P.A. Robe et al., *Clin. Cancer Res.*, **10**(16) (2004) 5595.
- [4] R.J. Bridges et al., *Br. J. Pharmacol.*, **165**(1) (2012) 20.
- [5] W.J. Chung et al., *J. Neurosci.*, **25**(31) (2005) 7101.
- [6] S. Clarysse et al., *Eur. J. Pharm. Sci.*, **43**(4) (2011) 260.
- [7] ICH M9 guideline on biopharmaceutics classification system-based biowaivers, EMA/CHMP/ICH/493213/2018, 10 February 2020.

Ru–Co–CeO₂ CATALYSTS FOR SELECTIVE CO₂ HYDROGENATION: INFLUENCE OF SURFACE AREA, CRYSTALLINITY, AND METAL COMPOSITION

Katarzyna Flor, Chris H J Franco, Karolina Ledwa

*Institute of Low Temperature and Structure Research, PAS,
Okólna 2, 50-422 Wrocław*

The catalytic hydrogenation of CO₂ to CO has emerged as a favorable strategy for CO₂ utilization, as CO is a valuable C1 platform molecule for the synthesis of liquid fuels and chemicals. However, the preferential formation of CH₄ through deep hydrogenation over Metal-Ru-based catalysts remains a major challenge for achieving selective CO production [1,2]. In this context, this work evaluates the catalytic hydrogenation of CO₂ toward CO and CH₄ over three ceria-based catalysts, Ru_{0.05}Ce_{0.95}O₂, Co_{0.10}Ce_{0.90}O₂, and Ru_{0.05}Co_{0.10}Ce_{0.85}O₂, by correlating CO₂ conversion, product selectivity, surface area, crystallite size, and crystallinity. Among the catalysts, Ru_{0.05}Ce_{0.95}O₂ exhibited the highest BET surface area (106.8 m²·g⁻¹), small crystallite size (4.9–5.0 nm), and the highest crystallinity within the series (61.9%). In the intermediate temperature range, Ru_{0.05}Ce_{0.95}O₂ strongly favored deep hydrogenation to CH₄, reaching CH₄ selectivity above 90% and an estimated maximum CH₄ yield of approximately 49.8% at 410 °C. In contrast, Co_{0.10}Ce_{0.90}O₂ presented the lowest BET surface area (71.4 m²·g⁻¹), the largest crystallite size (6.6 nm), and intermediate crystallinity (32.6%). This catalyst displayed the most selective behavior for the reverse water–gas shift pathway, favoring CO formation with increasing temperature [3]. CO selectivity became complete at approximately 488 °C (≈ 40%), while CO₂ conversion reached 64.9% at 762 °C.

The weak CH₄ formation observed for Co_{0.10}Ce_{0.90}O₂ (yield ≈ 3%, 300–400 °C) indicates that Co incorporation into the CeO₂ fluorite lattice favors CO production while suppressing further hydrogenation to methane. The bimetallic Ru_{0.05}Co_{0.10}Ce_{0.85}O₂ catalyst showed intermediate BET surface area (87.6 m²·g⁻¹), small crystallite size (4.8 nm), and the lowest crystallinity (24.1%), indicating a highly defective and structurally heterogeneous ceria-based material. Catalytically, Ru_{0.05}Co_{0.10}Ce_{0.85}O₂ reached a maximum CO₂ conversion of 65.5% at 759 °C and displayed a CH₄ formation, with an estimated maximum CH₄ yield of approximately 32.3% at 464 °C. After the catalytic reaction, all catalysts exhibited crystallite growth, with final sizes increasing from 6.6 to 14.6 nm for Co_{0.10}Ce_{0.90}O₂ and from approximately 4.8–4.9 to 17.9 nm for both Ru_{0.05}Ce_{0.95}O₂ and Ru_{0.05}Co_{0.10}Ce_{0.85}O₂.

The results demonstrate that Ru_{0.05}Ce_{0.95}O₂ is the most active catalyst for CO₂ methanation, owing to its high surface area, small crystallite size, and efficient Ru/CeO₂ interfacial sites. In contrast, Co_{0.10}Ce_{0.90}O₂ is the most suitable catalyst for selective CO production via RWGS (reverse water-gas shift reaction), despite its lower surface area, highlighting the key role of Co/CeO₂ sites in suppressing methane, and favoring CO formation [3]. The bimetallic Ru_{0.05}Co_{0.10}Ce_{0.85}O₂ exhibits an intermediate balance between activity and selectivity.

A-42

In summary, our results indicate that Ru and Co incorporation can be used to tune metal–CeO₂ catalyst selectivity, shifting the reaction pathway from CH₄ formation toward CO production by controlling the dopant composition.

Acknowledgments

This work was financially supported by the National Science Centre, Poland, under the SONATA 19 grant no. 2023/51/D/ST4/00339.

Literature

- [1] Y. Qi, B. Zhang, D. Xue, H. Zhang, X. Liu, Zhi Liu, S. Zhao, Z. Li, F. Meng, Y. Qin, *ACS Appl. Mater. & Interfaces*, **16**(49) (2024) 67876.
- [2] S. López-Rodríguez, A. Davó-Quiñonero, E. Bailón-García, D. Lozano-Castelló, F. C. Herrera, E. Pellegrin, C. Escudero, M. García-Melchor, A. Bueno-López, *J. Phys. Chem., C* **125**(46) (2021) 25533.
- [3] L. Wang; H. Liu, Y. Chen, S. Yang, *Int. J. Hydr. Energy*, 42 (6), (2017) 3682.

2,1,3-BENZOSELENADIAZOLE-BASED CHALCONES: SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDIES

Andrii Pyrih¹, Bożena Kamińska², Jakub Górniak², Andrzej Gzella¹

¹ Department of Organic Chemistry, Poznan University of Medical Sciences,
ul. Rokietnicka 3, 60-806, Poznań, Poland

² The Student Scientific Society at the Department of Organic Chemistry, Poznan
University of Medical Sciences, ul. Rokietnicka 3, 60-806, Poznań, Poland

2,1,3-Benzoselenadiazole system is of special interest for increasingly growing organoselenium chemistry mainly due to its application in crystal engineering, but also for being core moiety in molecules with anticancer, antiviral effects, and, particularly, agents mitigating neurological diseases [1,2]. Chalcone scaffold, on the other hand, is present in both natural and synthetic molecules targeting the key proteins involved in neurodegeneration: monoamine oxidase B, β -secretase, acetyl- and butyrylcholinesterases [3]. The combining of these two structural motifs within a single molecule holds significant potential for developing novel therapeutics for neuropharmacology.

The presentation will discuss the synthetic approach for the novel family of benzo[*c*][1,2,5]selenadiazol-5-yl)-1-phenylprop-2-en-1-ones along with their crystallographic analysis. The influence of substituent's nature at the position *para* of the phenyl ring on the supramolecular assembly patterns will be highlighted. Self-complementary dimeric chalcogen squares, formed by Se \cdots N bonds, characteristic synthon based on the selenadiazole core, was observed in most cases (substituents: H, F, Cl, Br atoms, hydroxy group) (Fig. 1). The implementation of the methoxy group to this position rearrange the supramolecular architecture, breaking the complementarity and promoting chalcogen bonds formation between oxygen atoms of methoxy and carbonyl groups respectively with selenium atom of selenadiazole ring (Fig. 2).

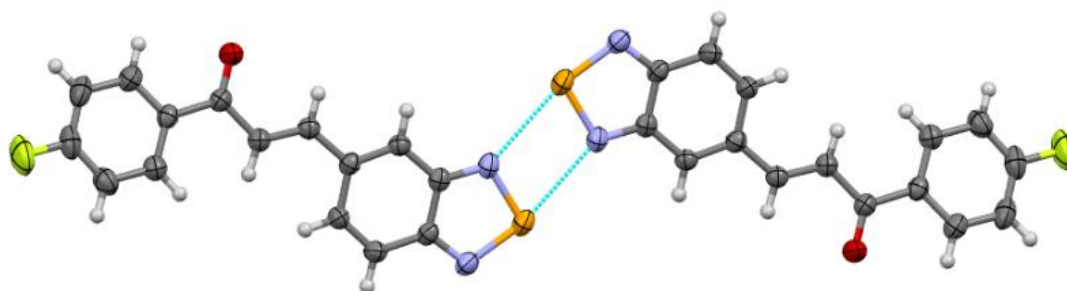


Fig. 1. Chalcogen bonds in a chalcone crystal with fluorine-containing molecules.

A-43

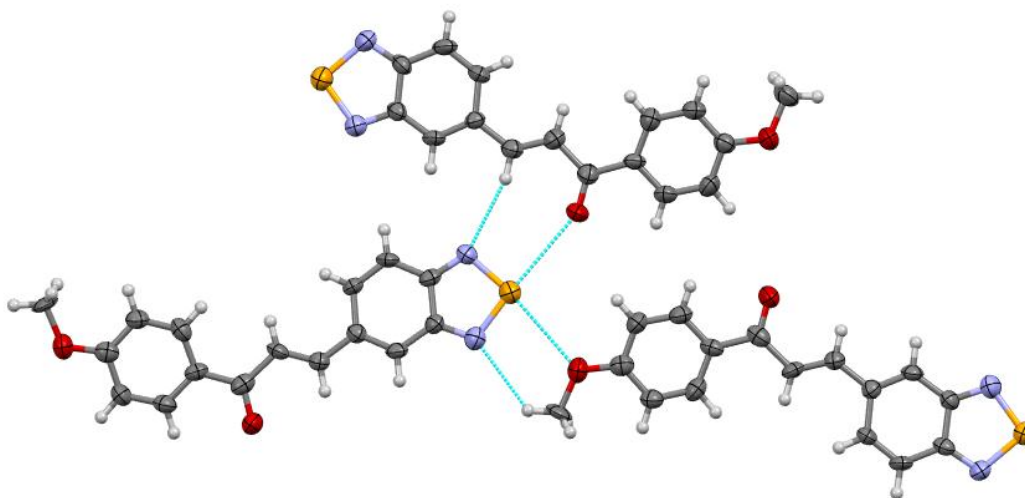


Fig. 2. Chalcogen bonds in a chalcone crystal with molecules containing a methoxy group.

Literature

- [1] P. Pyka, S. Garbo, R. Fioravanti, C. Jacob, M. Hittinger, J. Handzlik, C. Zwergel, C. Battistelli, *Drug Discov. Today*, **8** (2024) 104062.
- [2] A. C. Ruberte, C. Sanmartin, C. Aydillo, A. K. Sharma, D. Plano, *J. Med. Chem.*, **63** (2020) 1473.
- [3] P. Sharma, M. Singh, *Life Sci.*, **320** (2023) 121568.

SHORT SYMMETRIC HYDROGEN BONDS IN CRYSTALS OF ADENINE SALTS: A CHALLENGING CASE FOR QUANTUM CRYSTALLOGRAPHY APPROACHES

Alicja Preżyna, Anna Makal

University of Warsaw, Faculty of Chemistry, Biological and Chemical Research Centre, Żwirki i Wigury 101, 02-089 Warsaw, Poland

Hydrogen bonds are crucial types of intermolecular interactions responsible for stabilization and packing of crystal structures. An accurate description of hydrogen bonds is therefore essential for understanding the structural, mechanical, thermodynamic, and spectroscopic properties of crystalline materials. However, hydrogen-atom positions derived from conventional X-ray crystallography are inherently biased, limiting the reliability of hydrogen-bond characterization.

Modern Quantum Crystallography, including approaches based on aspherical atomic scattering factors from databanks such as DISCaMB MATTS [1] and methods incorporating quantum-mechanical calculations, such as Hirshfeld Atom Refinement (HAR) [2,3], have brought significant improvements in the field and allowed modelling H-bonding accurately even in complex molecular and macromolecular systems. Nevertheless, these methods still face important challenges and limitations.

In this work, we investigate an adenine salt with mellitic acid (tetraadeninium dihydrogen mellitate tetrahydrate), whose crystal structure is stabilized by numerous hydrogen bonds of variable geometry and strength, including exceptionally short, symmetric O–H \cdots O interactions. The performance of Transferable Aspherical Atom Model (TAAM) [4-5] and HAR refinements against high-resolution, high-quality X-ray diffraction data is evaluated with respect to hydrogen-atom positions and atomic displacement parameters. The results are benchmarked against a crystal structure model obtained from single-crystal neutron diffraction, providing a rigorous assessment of the accuracy of contemporary quantum-crystallographic approaches for hydrogen-bond modeling.

Literature

- [1] P. M. Rybicka et al., *J. Chem. Inf. Model.*, **62** (2022) 3766–3783.
- [2] S. C. Capelli, H.-B. Bürgi, B. Dittrich, S. Grabowsky, D. Jayatilaka, *IUCrJ*, **1**(5) (2014) 361–379.
- [3] M. Woińska, S. Grabowsky, P. M. Dominiak, K. Woźniak, D. Jayatilaka, *Science Advances*, **2**(5) (2016) e1600192.
- [4] M. Malinska, Z. Dauter, *Acta Crystallographica Section D: Structural Biology*, **72**(6) (2016) 770–779.
- [5] M. Kulik, P. M. Dominiak, *Computational and Structural Biotechnology Journal*, **20** (2022) 6237–6243.

Access to the neutron research infrastructure at the KOALA2 instrument at ANSTO was enabled via ACNS program proposal and associated beamtime P21222.

ROTATIONALLY ADAPTIVE CF₃ GROUP IN A TFA-PROTECTED PEPTIDOMIMETIC CRYSTAL: FROM WEAK F···H MOTIFS TO GPCR POCKET CONTACT CLASSES

Joanna Bojarska, Sepideh Jafari, Wojciech Wolf

*Wydział Chemiczny, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej PŁ
ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź*

Trifluoromethyl groups are common in bioactive molecules, yet their supramolecular role is often reduced to lipophilicity or treated as a questionable fluorine hydrogen bond [1]. We report the crystal structure of the new TFA-protected C α , α -dialkylated dipeptidomimetic Tfa–Aib–Deg–O–tBu and use it to examine how a disordered CF₃ group participates in weak contact networks [2]. The molecule forms a primary N–H···O hydrogen-bonding framework, while the CF₃ group is rotationally disordered over two orientations. Separate graph-set analysis of both components shows that rotation changes the fluorine atom and donor partner involved, but preserves access to related F···H contact classes. The major component contributes mainly through weak C–H···F motifs, whereas the minor component additionally gives an intramolecular N–H···F S(5) contact. Comparison with related CSD structures, Hirshfeld fingerprints, enrichment ratios and energy-framework analysis shows that F···H/H···F contacts are recurrent and surface-significant, but not dominant strong synthons, belonging instead to a dispersion-supported weak-contact regime [3,4]. We therefore describe CF₃ as a rotationally adaptive multi-contact node [5]. This crystal-derived contact language is relevant to GPCR ligand design, where CF₃ substituents may improve pocket recognition not through a single strong fluorine bond, but by sampling multiple weak C–H-rich and polar microenvironments [1].

Literature

- [1] K. Müller, C. Faeh, F. Diederich, *Science*, **317** (2007) 1881–1886.
- [2] J. Bojarska et al., *CrystEngComm*, **24** (2022) 8372–8389.
- [3] D. Dey et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016, **18**, 31811–31820.
- [4] H.-J. Schneider, *Chem. Sci.*, **3** (2012) 1381–1394.
- [5] J. Bojarska, M. Breza, S. Jafari, W. M. Wolf, *CrystEngComm* (2026).

SYNTHETIC DERIVATISATION APPROACHES FOR CRYSTALLISATION AS A ROUTE TO STRUCTURAL ELUCIDATION

Giovanna Martins^{*1,2}, Michael R. Probert¹, Michael J. Hall¹

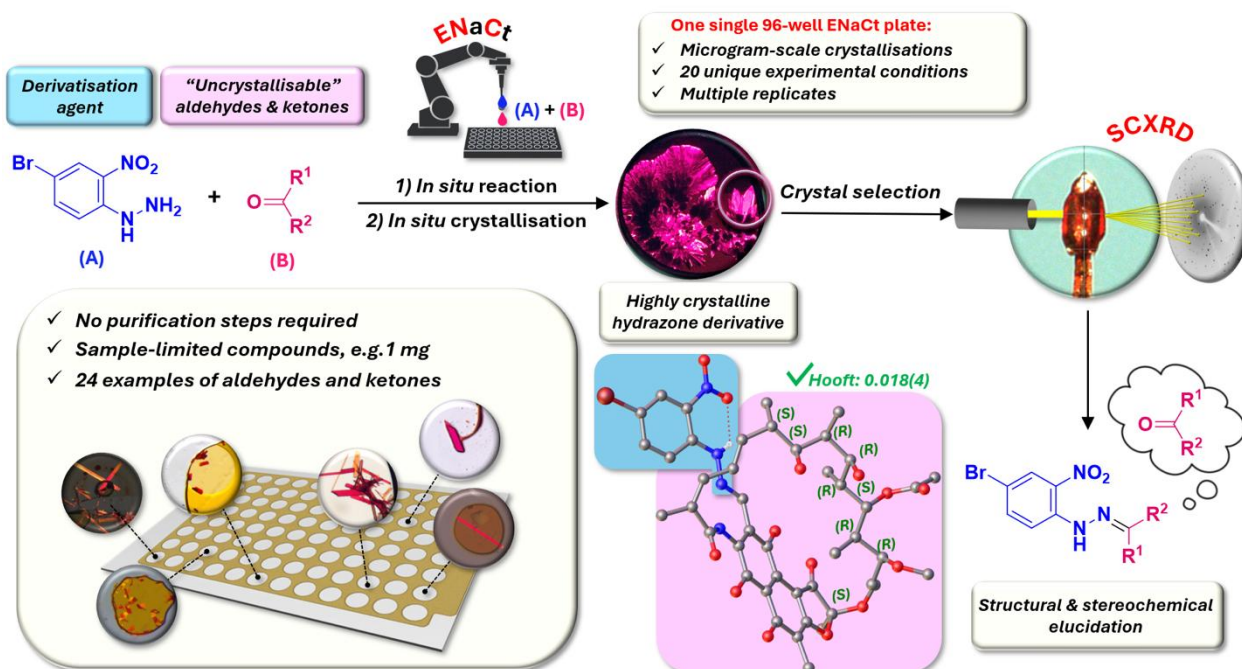
¹ *School of Natural and Environmental Sciences, Newcastle University*

² *Indicatrix Crystallography Ltd., Bedson Building, Newcastle University, NE1 7RU, UK*

**e-mail: g.barrionuevo-martins2@newcastle.ac.uk*

Accessing crystal forms of a compound is a key step in structural elucidation, allowing for the determination of absolute stereochemistry, via single crystal X-ray diffraction (SCXRD) analysis. However, growing high-quality single crystals for SCXRD analysis can be challenging, particularly of complex molecules such as natural products [1]. The high-throughput ENaCt protocols can often aid crystallisation of complex molecules [2]. However, when crystallisation is still unsuccessful, additional methods must be employed. Herein, we demonstrate a novel approach utilising functionalised crystallisation of “uncrystallisable” aldehydes and ketones for structural elucidation. Our approach employs an *in-situ* condensation reaction between carbonyl containing molecules and a custom designed arylhydrazine within the crystallisation nanodroplet. This approach aims to enhance molecular interactions promoting crystallisation and improving anomalous X-ray signal to aid stereochemical elucidation. The derivatisation reactions take place within a single 150 nL droplet of organic solvent encapsulated within an inert oil, resulting in highly crystalline hydrazone products. The reaction is designed to leave the stereochemistry of the parent molecule intact. These hydrazones are subsequently analysed by single crystal X-ray diffraction (SCXRD), allowing the structure and absolute stereochemistry of the parent molecule to be inferred. The generality of this approach is exemplified via the *in-situ* synthesis and SCXRD analysis of several new crystalline hydrazones, as a method for the structural elucidation of “uncrystallisable” carbonyl-containing small organic molecules. These include challenging examples of natural products and bioactive molecules, such as the novel crystal structure of a Rifamycin derivative.

A-46



Literature

- [1] J. P. Metherall, R. C. Carroll, S. J. Coles, M. J. Hall, M. R. Probert, Advanced crystallisation methods for small organic molecules. *Chem. Soc. Rev.*, **52**(6) (2023) 1995–2010.
- [2] A. R. Tyler, R. Ragbirsingh, C. J. McMonagle, P. G. Waddell, S. E. Heaps, J. W. Steed, P. Thaw, M. J. Hall, M. R. Probert, Encapsulated Nanodroplet Crystallization of Organic-Soluble Small Molecules. *Chem.*, **6**(7) (2020) 1755–1765.

**STRUCTURAL STUDIES OF BUTANE-1,4-DIYL
BIS-(TRI-FLUORO-METHANE-1-SULFONATE): VARIABLE-
TEMPERATURE SCXRD AND THERMAL EXPANSION**

Przemysław Nowak^{1,2}, Marta Hoelm³, Bartłomiej Kost¹, Marta K. Dudek¹

¹ *Center of Molecular and Macromolecular Studies PAS, Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź*

² *BioMedChem Doctoral School of University of Lodz and Lodz Institutes of PAS, Matejki 21/23, 90-237 Łódź*

³ *University of Łódź, Faculty of Chemistry, Department of Physical Chemistry, Pomorska 163/165, 90-236 Lodz*

Chemistry of organic fluorine compounds has become one of the most dynamic areas of modern chemical research. The growing significance of fluorine-containing compounds is clearly reflected in pharmaceutical and agrochemical research. Also, they have been successfully employed in advanced functional materials, including photothermo-refractive glasses, high-performance lubricants, and bioactive molecules, owing to their favorable mechanical properties, chemical stability, and biocompatibility [1]. Due to the wide applicability of such compounds in this work, we investigated the solid form of butane-1,4-diyl bis(trifluoromethane-1-sulfonate) [Fig. 1.] called BTS, whose structure was unknown.

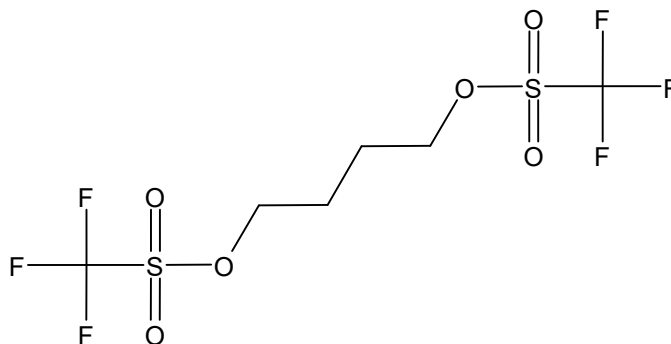


Fig. 1. Structure formula of butane-1,4-diyl bis(trifluoromethane-1-sulfonate) (BTS).

For the BTS single crystal X-ray diffraction measurement was conducted at 100 K, and the crystal structure was elucidated (Fig. 2.). The structure is stabilized mainly by chalcogen and fluorine-fluorine interactions. The simulated powder pattern for this structure and the registered one at room temperature did not match, but shared strong similarities. At this point, we conducted variable-temperature X-ray measurements on a single crystal of BTS and obtained structures from data collected at 293 K, 273 K, 223 K, and 173 K. Temperature-dependent X-ray diffraction measurements reveal smooth, continuous, and anisotropic thermal expansion [Fig. 3.] without any indication of phase instability or a structural phase transition. To extend our research and describe thermal expansion, we used the PASCAL online tool to calculate the volume and axial thermal expansion coefficients. Compared to the literature mean of 168.8 MK^{-1} [2] for volumetric coefficient, our compound presents a high value of 254.4165 MK^{-1} .

A-47

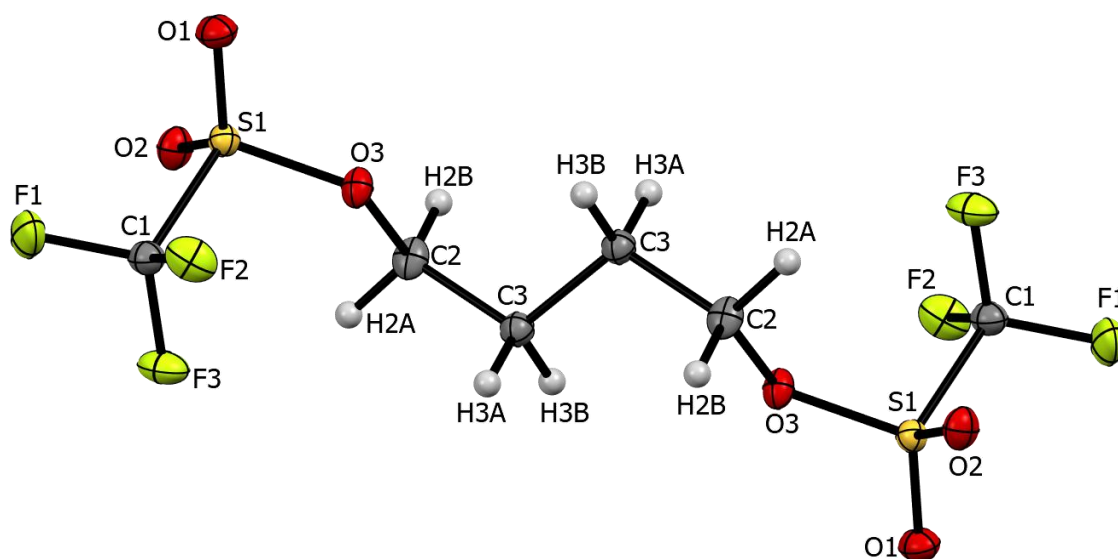


Fig. 2. Structure of BTS with atom numbering scheme. Ellipsoids are drawn at 50% probability. Data were collected at 100 K.

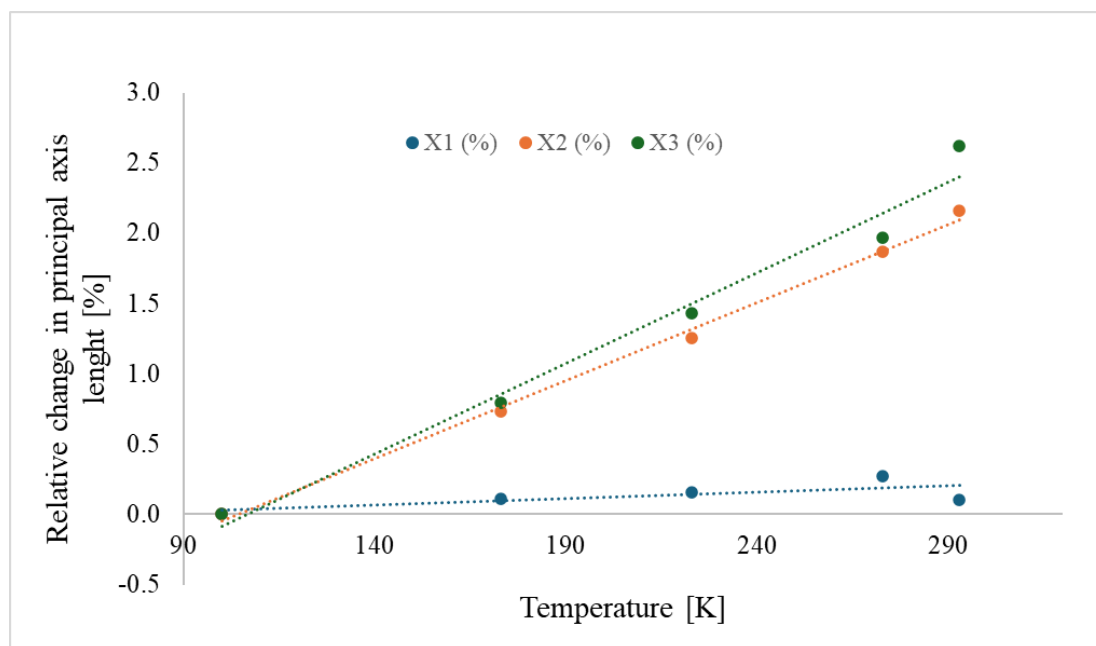


Fig. 3. Percentual thermal expansion along the three orthogonal directions in the structure of BTS.

Literature

- [1] C. Tantardini, F. N. Jalolov, A.G. Kvashnin, *J. Phys.Chem. C*, **126** (2022) 11358–11364.
- [2] A. van der Lee, D. G. Dumitrescu, *Chem. Sci.*, **12** (2021) 8537–8547.

PROJEKTOWANIE, SYNTEZA I BADANIE FAZY STAŁEJ W UKŁADACH WIELOSZKŁADNIKOWYCH ZAWIERAJĄCYCH WYBRANE PARY LEK-NUTRACEUTYK ORAZ LEK-LEK

**Katarzyna Niedośpiał¹, Izabela Madura¹, Helena Butkiewicz¹,
Agnieszka Adamczyk-Woźniak², Aneta Pobudkowska-Mirecka², Edyta Pindelska³,
Maja Morawiak⁴**

¹ *Katedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska,
ul. Stanisława Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa*

² *Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska,
ul. Stanisława Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa*

³ *Katedra i Zakład Chemii Farmaceutycznej i Biomateriałów, Wydział Farmaceutyczny,
Warszawski Uniwersytet Medyczny, ul. Stefana Banacha 1, 02-097 Warszawa*

⁴ *Instytut Chemii Organicznej PAN, ul. Marcina Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa*

Badanymi substancjami leczniczymi są lewofloksacyna i ciprofloksacyna, należące do grupy III generacji antybiotyków tzw. fluorochinolonów.

Celem badań jest poprawa właściwości farmakologicznych antybiotyków takich jak: rozpuszczalność, szybkość uwalniania i wchłaniania leku, ale także otrzymanie nowych układów o nowych właściwościach, innych niż wyjściowe komponenty. Wykorzystując nowe narzędzia w programie CSD-Mercury [1] dobrano odpowiednie nutraceutyki do syntez oraz podjęto próbę otrzymania nowych związków z wykorzystaniem benzoksaboroli (substancji leczniczych o właściwościach przeciwwgrzybiczych).

Syntezę przeprowadzono z użyciem metod mechanochemicznych oraz metody rozpuszczalnikowej [2]. Zastosowano ucieranie na sucho oraz z dodatkiem rozpuszczalnika w homogenizatorach, a także w młynie kulowym z kulkami metalowymi oraz agatowymi.

Ucieranie z dodatkiem rozpuszczalnika okazało się skuteczną metodą w otrzymywaniu wybranych układów lek-nutraceutyk i lek-lek. Występowanie nowych faz stałych potwierdzono metodami dyfrakcji proszkowej oraz spektroskopii IR. Z układu etanol-kwas octowy otrzymano nową sól ciprofloksacyny, której strukturę potwierdzono badaniem dyfrakcji rentgenowskiej na próbkach monokrystalicznych.

Wykorzystane metody syntezy wskazują na właściwy kierunek badań w otrzymywaniu nowych faz o potencjalnym zastosowaniu w farmaceutykach, w szczególności w lekach w formie maści.

Literatura

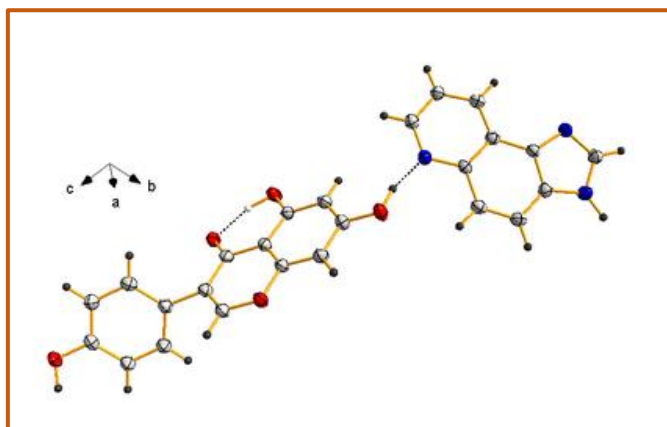
- [1] C. F. Macrae et al., Mercury 4.0: from visualization to analysis, design and prediction. *Journal of Applied Crystallography*, **53** (2020) 226–235. DOI: 10.1107/S1600576719014092
- [2] D. Braga, L. Maini, et al., Mechanochemical preparation of co-crystals. *Chemical Society Reviews*, **42** (2013) 7638–7648. DOI: 10.1039/C3CS60014A

NOWY KOKRYSTAŁ GENISTEINY – INŻYNIERIA KRYSTALICZNA VS METODY *IN SILICO*

Natalia Mikłuszka, Marcin Sobczyk, Aneta Jezierska, Andrzej Kochel

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

Flawonoidy są związkami pochodzenia naturalnego, które często wykazują aktywność biologiczną. Ze względu jednak na ich ograniczoną rozpuszczalność w wodzie, w projektowaniu nowych farmaceutyków flawonoidy coraz częściej otrzymuje się w postaci kokryształów, co zazwyczaj zwiększa ich rozpuszczalność, a tym samym biodostępność [1]. Flawonoidy znajdują również zastosowanie w innych dziedzinach, takich jak optoelektronika, przykładowo w materiałach wykazujących luminescencję, technologiach OLED czy ogniwach fotowoltaicznych [2].



Rys. 1. Struktura molekularna kokryształu genisteiny z 1H-imidazo[4,5-f]chinoliną. Elipsoidy termiczne dla atomów niewodorowych narysowano z 50% prawdopodobieństwem [3].

Otrzymany związek krystalizuje w układzie jednoskośnym, przy stosunku stechiometrycznym cząsteczek 1:1. W kryształach występują wiązania wodorowe wewnątrz- jak i międzycząsteczkowe, które stabilizują strukturę krystaliczną. Kokryształ wykazuje również właściwości luminescencyjne. Wykonano symulacje kwantowo-chemiczne oparte na Teorii Funkcjonału Gęstości (DFT) oraz metodzie dynamiki molekularnej Cara i Parrinello (CP-MD). Rezultaty badań dostarczyły cennych informacji o roli oddziaływań niekowalencyjnych, ruchu protonu w mostku wodorowym, a także zmianach wybranych parametrów fizykochemicznych w czasie.

Autorzy dziękują centrom obliczeniowym ACK Cyfronet AGH w Krakowie (grant PLG/2025/018939) oraz Wrocławskiemu Centrum Sieciowo-Superkomputerowemu (WCSS) we Wrocławiu (grant 206) za udostępnienie zasobów obliczeniowych w celu realizacji projektu.

Literatura

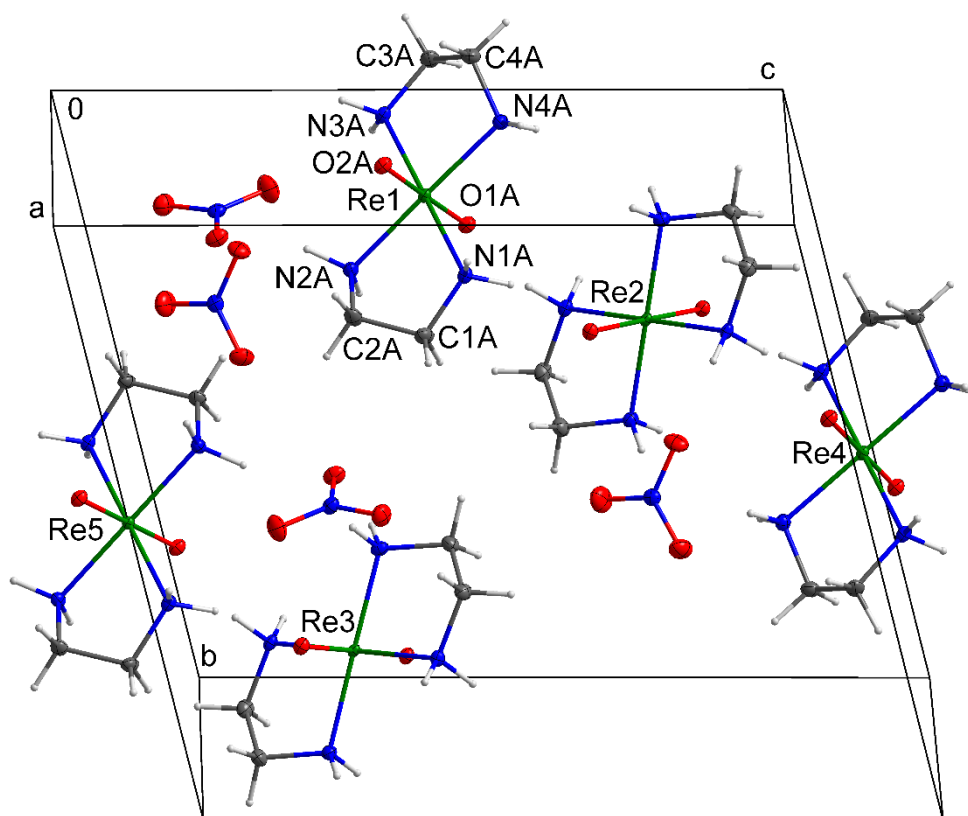
- [1] N. Qiao, M. Li, W. Schindwein, N. Malek, A. Davies, G. Trappitt, *Int J Pharm*, **419** (2011) 1.
- [2] H. Y. Liu, Y. C. Li, X. D. Wang, *Cryst Eng Comm*, **25** (2023) 3126.
- [3] H. Putz, K. Brandenburg, *Diamond – Crystal and Molecular Structure Visualization*; Crystal Impact GbR (2023).

NIETYPOWA FAZA W KRYSZTALE $[\text{ReO}_2(\text{en})_2]\text{NO}_3$ JAKO WYNIK SZYBKIEGO CHŁODZENIA (FLASH COOLING)

Monika K. Krawczyk

*Instytut Fizyki Doświadczalnej, Uniwersytet Wrocławski
Pl. M. Borna 9, 50-204 Wrocław*

Odkryto drugi przykład zjawiska występowania nowej fazy indukowanej szybkim chłodzeniem (flash cooling). Pierwsze zjawisko zaobserwowano w kryształach trifenylosilanolu (Ph_3SiOH) [1]. Prezentowane badania dowodzą, że w kryształach *trans*-dioksydobis(etylenodiamina)ren(V) o wzorze $[\text{ReO}_2(\text{en})_2]\text{NO}_3$ [2], który poddany został szybkiemu chłodzeniu z temperatury pokojowej do temperatury około 100 K, powstaje nowa faza charakteryzująca się czterokrotnym wzrostem objętości komórki elementarnej.



Rys. 1. Struktura soli $[\text{ReO}_2(\text{en})_2]\text{NO}_3$ w temperaturze 100 K. Elipsoidy drgań atomów Re, O, N i C podano z prawdopodobieństwem 50%.

Literatura

- [1] M. K. Krawczyk, *Acta Cryst. B.*, **79** (2023) 245.
[2] T. Lis, T. Głowiak, B. Jeżowska-Trzebiatowska, *Bull. Acad. Polon. Sci., Ser. Sci. Chim.*, **23** (1975) 417.

HETEROMETALLIC GROUP 4-RARE EARTH OXIDE NANOMATERIALS FOR RADIOACTIVE WASTE IMMOBILIZATION

Karolina Matuszak, Rafał Petrus

Wrocław University of Science and Technology, Faculty of Chemistry, 23 Smoluchowskiego, 50-370 Wrocław

This study focuses on developing an efficient synthesis method for functional pyrochlore-type oxide nanomaterials designed for the effective immobilization of radioactive waste. Binary oxide nanomaterials with the general formula $\text{RE}_2\text{M}'_2\text{O}_7$ (where RE is a rare-earth metal and M' is a group 4 metal) represent a versatile class of heterometallic materials. Their diverse chemical and physical properties—such as high thermal and radiation stability, elevated melting points, and chemical resistance—are strongly depended on oxygen vacancies, chemical composition, and the structural ordering of RE^{3+} and M'^{4+} ions. These attributes make them exceptionally promising for radioactive waste management. For instance, modified $\text{RE}_2\text{M}'_2\text{O}_7$ nanomaterials can be tailored to incorporate specific fission products like Strontium-90 and Cesium-137. Furthermore, the substitution of RE^{3+} ions in place of yttrium in $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ can be used for the immobilization of model ions La, Nd, and Eu which act as surrogates for Ac(III), Cm(III), and Am(III), respectively.

Depending on the ionic radii ratio $r(\text{RE}^{3+})/r(\text{M}'^{4+})$, these oxides crystallize into either a disordered fluorite structure (favored when the ratio is below 1.46) or a stable cubic pyrochlore structure (formed when the ratio ranges between 1.46 and 1.78).

In this study, heterometallic group 4-rare earth oxo-alkoxides $[\text{RE}_2\text{Ti}_4(\mu_4\text{-O})_2(\mu_3\text{-OEt})_2(\mu\text{-OEt})_8(\text{OEt})_6(\text{Cl})_2(\text{HOEt})_2]$ (RE = La (1), Y (2), Nd (3)), $[\text{La}_2\text{M}'_2(\mu_3\text{-O})(\mu\text{-OEt})_5(\mu\text{-Cl})(\text{OEt})_2(\text{HOEt})_4(\text{Cl})_4]_n$ (M' = Zr (4), Hf (5)), $[\text{Nd}_4\text{M}'_4(\mu_3\text{-O})_2(\mu\text{-OEt})_{10}(\mu\text{-Cl})_4(\text{OEt})_8(\text{HOEt})_{10}(\text{Cl})_2]$ (M' = Zr (6), Hf (7)), and $[\text{Cp}_2\text{TiYb}(\mu\text{-OEtOMe})_2(\text{EtOH})\text{Cl}_2]$ (8) (HOEt = ethanol, HOEtOMe = 2-methoxyethanol) were synthesized, structurally characterized, and used as molecular precursors to obtain oxide nanomaterials $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, $\text{La}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$, $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, $\text{Nd}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$, $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, and $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ (Fig. 1).

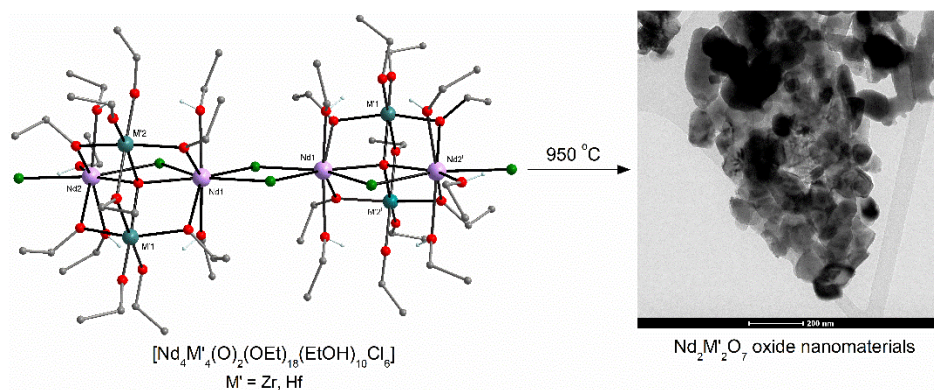


Fig. 1. The synthesis of $\text{Nd}_2\text{M}'_2\text{O}_7$ nanomaterial by thermal decomposition of $[\text{Nd}_4\text{M}'_4(\text{O})_2(\text{OEt})_{18}(\text{HOEt})_{10}(\text{Cl})_6]$.

A-51

The crystallographic data show that **1-3** are centrosymmetric hexanuclear clusters in which RE centers surrounded by O₇Cl donors adopt a square antiprismatic geometry, and titanium atoms coordinated with O₆ donors form distorted octahedrons. In **4** and **5** the lanthanum atoms are by one oxo, three chloro, and four ethoxo ligands and adopt a triangular dodecahedral geometry; the M' atoms coordinated by one chloro, one oxo, and four ethoxo groups form distorted octahedrons. Compounds **6** and **7** are octanuclear clusters formed by two {Nd₂M'₂(μ₃-O)(μ-OEt)₅(μ-Cl)(OEt)₄(HOEt)₅(Cl)} units bridged by two μ-Cl group.

Acknowledgment: The authors want to thank National Science Centre for financial support under grant no. 2023/49/B/ST4/04068.

Literature

- [1] X. Lu, Y. Ding, H. Dan, M. Wen, X. Mao, Y. Wu, X. Wang, *Materials Letters*, **136** (2014) 1–3.
- [2] T. Möller, A. Clearfield, R. Harjula, *Microporous and Mesoporous Materials*, **54** (2002) 187–199.
- [3] R. Petrus, K. Chomiak, J. Utko, M. Wilk-Kozubek, T. Lis, J. Cybinska, P. Sobota, *Inorg. Chem.*, **59** (2020) 8108–8120.
- [4] R. Petrus, K. Chomiak, J. Utko, A. Bieńko, T. Lis, P. Sobota, *Inorg. Chem.*, **59** (2020) 16545–16556.

HALOGEN-TUNED RECOGNITION OF PIPERAZINE DERIVATIVES BY CUCURBIT[7]URIL

David A. Rincón, Ewelina Zaorska, Maura Malinska

Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Pasteura 1, 02-093 Warsaw, Poland

Piperazine-based fragments are common motifs in bioactive molecules, but their supramolecular recognition by cucurbit[7]uril (CB[7]) remains underexplored, particularly for drug-like guests of moderate affinity. Here, we investigate a series of halogenated N-phenylpiperazine and 2-(piperazin-1-yl)pyrimidine derivatives as CB[7] guests using an integrated experimental and computational approach. Binding thermodynamics were determined by isothermal titration calorimetry, while selected complexes were characterized by single-crystal X-ray diffraction. Molecular simulations and interaction-energy analyses were used to connect the observed thermodynamic trends with host–guest geometry and ligand conformation [1].

The effect of halogen substitution on CB[7] affinity is strongly position-dependent. Para substitution becomes important mainly for larger, more polarizable halogens, especially iodine, which can interact with the carbonyl-lined portal and enhance enthalpic stabilization. Smaller halogens are more effective at the ortho and meta positions, where they provide weak cooperative contacts within the complex. The ortho-fluorinated derivatives are particularly favorable because they combine such host–guest contacts with intramolecular C–H \cdots F interactions that pre-organize the ligand in solution and reduce the entropic penalty of complexation.

The combined structural, thermodynamic, and computational analysis indicates that CB[7] recognition is governed not by a single dominant interaction, but by the interplay of host–guest shape complementarity, electrostatics, dispersion, and ligand flexibility. This interpretation is supported by prior conformational benchmarking of piperazine-based ligands against DLPNO–CCSD(T)/CBS reference energies, which provided a validated background for describing their intrinsic flexibility and protonation-dependent conformational preferences [2].

Together, these results demonstrate that moderate-affinity CB[7] complexes can reveal how substitution pattern, conformational pre-organization, and weak cooperative interactions govern the supramolecular recognition of pharmacologically relevant piperazine-based fragments. The broader relevance of these motifs is further illustrated by CB[7] binding studies of selected piperazine-containing drug molecules.

Literature

- [1] D. A. Rincón, E. Zaorska, M. Malinska, *RSC Adv.*, **15** (2025) 45555–45572.
[2] D. A. Rincón, E. Zaorska, M. Malinska, *ACS Omega*, **11** (2026) 2221–2234.

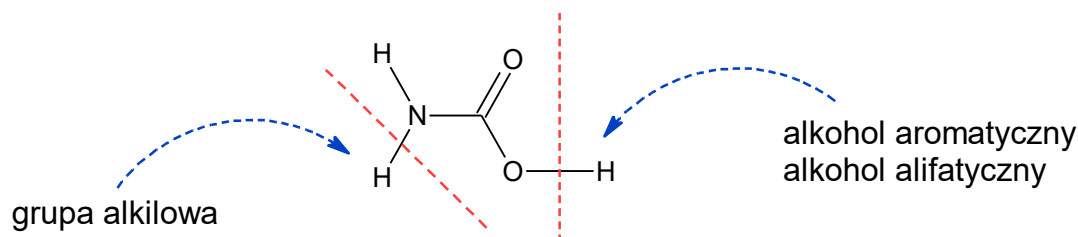
MOZAIKI MOLEKULARNE KWASU (3-AMINOPROPYLO)KARBAMINOWEGO

Anna Kwiecień¹, Andrzej Kocheł²

¹ Katedra i Zakład Podstaw Nauk Chemicznych, Wydział Farmaceutyczny,
Uniwersytet Medyczny we Wrocławiu, ul. Borowska 211a, 50-556 Wrocław

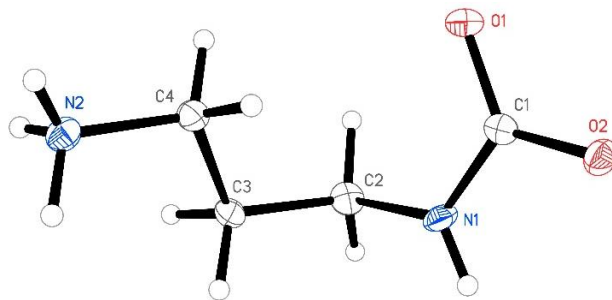
² Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

Kwas karbaminowy (kwas aminomrówkowy, Rys. 1) jest bardzo nietrwałym związkiem i ulega rozkładowi na dwutlenek węgla i amoniak. Kwas karbaminowy może być stabilizowany poprzez tworzenie soli (np. karbaminianu amonu) albo tworzenie estrów z alkoholami alifatycznymi lub aromatycznymi. Podstawienie grupą alkilową jednego z atomów wodoru przy atomie azotu prowadzi do utworzenie kwasu *N*-monoalkilokarbaminowego [1]. Estry kwasu *N*-metylokarbaminowego są insektycydami. Inne karbaminiany, tiokarbaminiany czy ditiokarbaminiany stosowano jako fungicydy i herbicydy [2]. Karbaminiany mają także szerokie zastosowanie w farmakologii (m.in. w terapii choroby Alzheimera, miastonii czy jaskry) [3]. Od lat 40-tych XX wieku karbaminiany badano także pod kątem potencjalnych chemicznych środków bojowych, dla niektórych z nich wykazano toksyczność porównywalną do VX [3].



Rys. 1. Wzór kwasu karbaminowego z zaznaczonymi miejscami wprowadzenia dodatkowych podstawników.

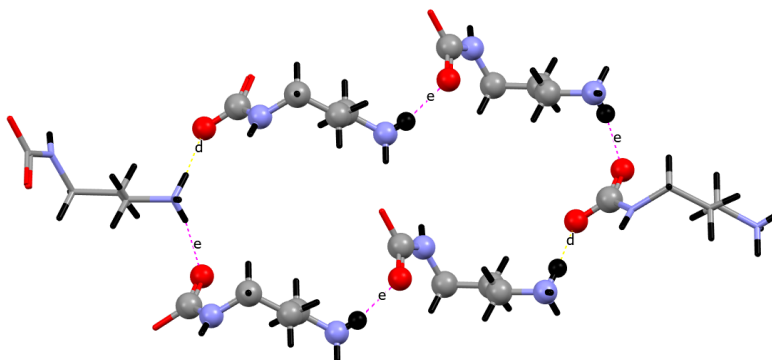
Kwas (3-aminopropylo)karbaminowy, otrzymany w katalitycznej reakcji z udziałem katalizatora na bazie Re(IV), krystalizuje jako jon obojnaczy (Rys. 2) w układzie jednoskośnym, typie grup przestrzennych $P2_1$, $a = 4.8483(4) \text{ \AA}$, $b = 12.1546(12) \text{ \AA}$, $c = 4.9961(3) \text{ \AA}$, $\beta = 96.575(7)^\circ$, $V = 292.48(4) \text{ \AA}^3$, $Z = 1$, $T = 100(2) \text{ K}$, $\rho_c = 1.341 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, $\mu = 0.107 \text{ mm}^{-1}$, $\theta_{\min} = 4.106^\circ$, $\theta_{\max} = 28.871^\circ$, $R_{\text{int}} = 0.0285$, $R_1 = 0.0398$, $wR_2 = 0.0651$, $\text{GoF} = 0.931$.



Rys. 2. Struktura molekularna zwitterionu kwasu (3-aminopropylo)karbaminowego.

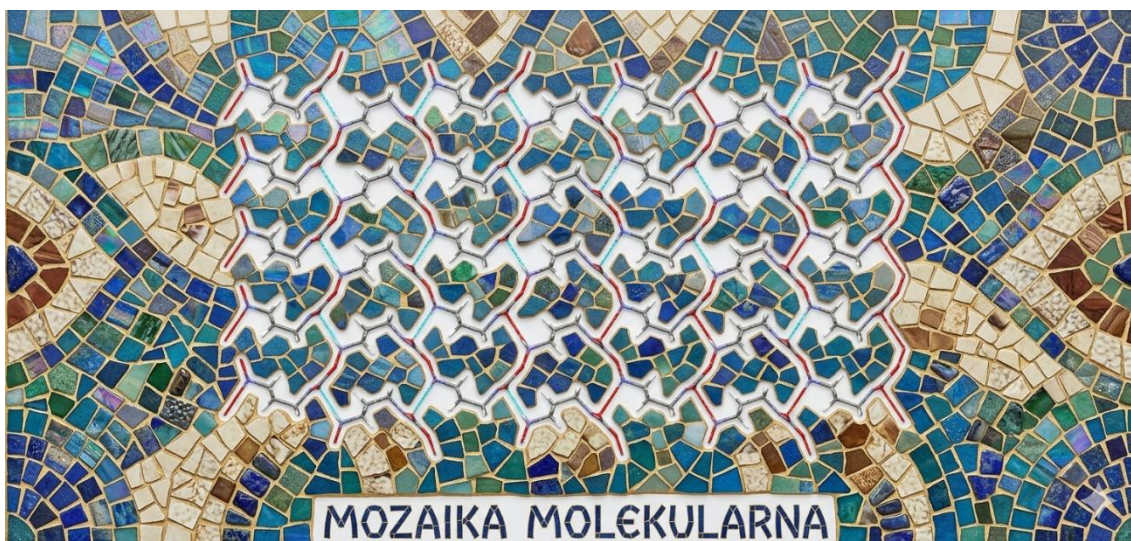
A-53

Struktura krystaliczna stabilizowana jest przez szereg międzycząsteczkowych wiązań wodorowych N-H...O, które tworzą szereg motywów wiązań wodorowych między innymi grafy R_6^5 (36), R_6^6 (38) – poniżej (Rys. 3) przykład jednego z grafów.



Rys. 3. Motyw wiązań wodorowych tzw. graf R_6^6 (38).

W sieci krystalicznej natomiast różnorodność wiązań wodorowych odpowiada za powstanie „mozaiki molekularnej” (Rys. 4).



Rys. 4. Jedna z form „mozaiki molekularnej” powstającej w kryształach.

Literatura

- [1] D. J. Ecobichon “*Carbamate Insecticides*” [rozdział 52 w R. I. Krieger, W. C. Krieger, “*Handbook of Pesticide Toxicology*”, Academic Press, **2** (2001) 1087–1106].
- [2] H. Heinzen, M. V. Cesio “*Carbamate pesticides*” [rozdział w P. Wexler (redaktor naczelny) “*Encyclopedia of Toxicology*” (Fourth Edition), Academic Press, **2** (2024) 485–491].
- [3] G. Palermo, Z. Kovarik, P. J. Hotchkiss, *Toxicology*, **480** (2022) 153322.

ODDZIAŁYWANIA SUPRAMOLEKULARNE W UKŁADACH TYMINA - KWASY KARBOKSYLOWE

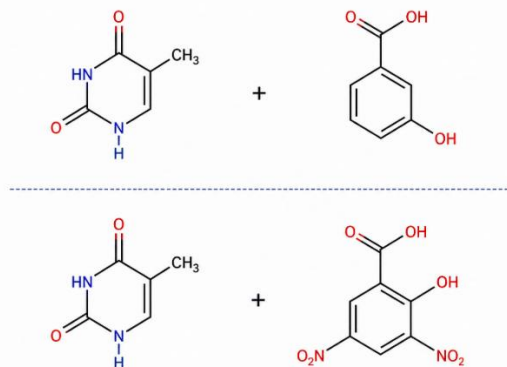
Olga Książkiewicz-Kołuca^{1,2}, Kinga Wzgarda-Raj¹, Marcin Palusiak¹

¹ Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Fizycznej,
ul. Pomorska 163/165, 91-236 Łódź

² Szkoła Doktorska BioMedChem UŁ i Instytutów PAN w Łodzi,
ul. Matejki 21/23, 90-237 Łódź

Celem pracy było otrzymanie kokryształów tyminy z wybranymi kwasami karboksylowymi, tj. kwasem 3-hydroksybenzoesowym oraz kwasem 3,5-dinitrosalicylowym. Tymina, znana również jako 5-metylouracyl, jest pochodną pirymidyny oraz jedną z czterech zasad azotowych występujących w DNA, gdzie odgrywa istotną rolę w przechowywaniu i przekazywaniu informacji genetycznej. Ze względu na znaczenie biologiczne pochodne tyminy znajdują zastosowanie w projektowaniu związków o potencjalnym działaniu przeciwwirusowym i przeciwnowotworowym.

Tymina jest również przykładem związku wykazującego polimorfizm, czyli zdolność do występowania w więcej niż jednej formie krystalicznej [1–3]. W ramach przeprowadzonych eksperymentów krystalizacyjnych otrzymano dwie odmienne formy krystaliczne tyminy, różniące się kształtem i pokrojem kryształów. Ponadto uzyskano dwa solwaty kokryształów tyminy z wybranymi kwasami karboksylowymi. Otrzymane struktury przeanalizowano pod kątem oddziaływań międzycząsteczkowych, ze szczególnym uwzględnieniem wiązań wodorowych, które odgrywają kluczową rolę w stabilizacji sieci krystalicznej oraz w uporządkowaniu cząsteczek w układzie supramolekularnym.



Rys. 1. Schemat krystalizacji tyminy z kwasem 3-hydroksybenzoesowym oraz 3,5-dinitrosalicylowym.

Literatura

- [1] D. E. Braun, T. Gelbrich, K. Wurst, U. J. Griesser, R. Feynman, *Cryst Growth Des.*, **16** (2016) 3480–3496.
- [2] R. Chennuru, P. Muthudoss, S. Ramakrishnan, A. Basha Mohammad, R. Ravi Chandra Babu, S. Mahapatra, S. K. Nayak, *J. Mol. Struct.*, **1120** (2016) 86–99.
- [3] J. Skiba, R. Karpowicz, I. Szab, B. Therrien, K. Kowalski, *J. Mol. Struct.*, **794** (2015) 216–222.

STABILNOŚĆ SUBSTANCJI O DZIAŁANIU PRZECIWBÓLOWYM W ŚRODOWISKU KWAŚNYM

Kamil Krzemiński, Helena Butkiewicz, Izabela Madura

*Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska, Stanisława Noakowskiego 3,
00-664 Warszawa*

Stabilność substancji czynnych jest kluczowa dla ich skuteczności i bezpieczeństwa stosowania. Jednym ze sposobów modyfikacji właściwości fizykochemicznych leków jest tworzenie układów wieloskładnikowych z odpowiednimi koformerami. Paracetamol jest powszechnie stosowanym lekiem przeciwbólowym, natomiast metacetamol, jego izomer strukturalny, pozostaje słabo poznany mimo wykazywanej aktywności biologicznej i występowania w dwóch formach polimorficznych. W badaniach uwzględniono również salicylamid substancję o działaniu przeciwbólowym, wpływającą nie tylko na ośrodkowy, ale również na obwodowy układ nerwowy. Chociaż paracetamol jest jedną z najpopularniejszych substancji aktywnych, wykazuje on działanie hepatotoksyczne, którego metacetamol i salicylamid – ze względu na inne szlaki metaboliczne – nie wykazują. Badanie zdolności tych związków do tworzenia układów wieloskładnikowych pozwala ocenić ich stabilność i potencjalne zastosowanie farmaceutyczne [1].

W celu analizy porównawczej istniejących struktur badanych leków wykorzystano programy CSD-ConQuest i CSD-Mercury [2], a następnie zaprojektowano nowe układy wieloskładnikowe. W wyniku ucierania substratów w obecności kwasów sulfonowych otrzymano nowe układy wieloskładnikowe, a ich powstanie potwierdzono za pomocą PXRD oraz UV-Vis. Dodatkowo, przeprowadzono obliczenia w programie ORCA [3] w celu wygenerowania symulowanych widm IR oraz UV-Vis, które następnie wykorzystano do analizy porównawczej z danymi otrzymanymi eksperymentalnie. Biorąc pod uwagę silne właściwości donorowo-akceptorowe kwasów sulfonowych oraz ich zdolność do tworzenia stabilnych wiązań wodorowych, stanowią one szczególnie obiecującą grupę substancji, również pod kątem ich potencjalnych zastosowań farmaceutycznych. Następnie, przeprowadzono również próby uzyskania kokryształów z kwasami o większym pKa występującymi w produktach spożywczych.

Kolejnym krokiem było nastawienie krystalizacji w celu otrzymania monokryształów układów wieloskładnikowych. Odkryto wówczas, że próbki po pewnym czasie ulegają zabarwieniu. Zauważono występowanie różnego zabarwienia tych samych układów w zależności od sposobu przygotowania próbki. W związku z tym wykonano jeszcze badania HPLC oraz UV-Vis w celu określenia stabilności badanych układów w zależności od mocy kwasów.

Literatura

- [1] N. Suzuki et al., Crystal Structure Analysis and Pharmaceutical Properties of Amide Salts Consisting of Paracetamol/Sulfonic Acids as Solid Forms Prepared by Grinding. *Crystal Growth & Design*, **20**(2) (2020) 590–599. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.9b00763>
- [2] C. F. Macrae et al., Mercury 4.0: from visualization to analysis, design and prediction. *Journal of Applied Crystallography*, **53** (2020) 226–235. <https://doi.org/10.1107/S1600576719014092>
- [3] F. Neese, The ORCA Program System. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, **2**(1) (2012) 73–78. <https://doi.org/10.1002/wcms.81>

LATTICE ENERGY-MELTING POINT PARADOX IN TETRACAINE

Michał Kaźmierczak*, Ewa Patyk-Kaźmierczak

Adam Mickiewicz University, Poznań

Faculty of Chemistry, Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań, Poland

**e-mail: kax@amu.edu.pl*

Determination of crystal structures is fundamental to understanding the properties of crystalline materials and it forms the backbone of crystal engineering—not only in the context of specific crystalline materials but also as a source of data for data-driven science. Remarkably, a number of widely used compounds still lack reported crystal structures. In this work, we present the crystal structure of tetracaine, an important Active Pharmaceutical Ingredient.

To date, only a very limited number of structural reports concerning its solid forms are available, and despite tetracaine having been known since 1928 [1], the crystal structure of the pure base has remained unresolved. We have revealed that tetracaine crystallizes in the monoclinic crystal system, space group $P2_1$, with one molecule in symmetry-independent part of the unit cell [2].

Our analysis shows that crystal aggregation is governed by the formation of N–H \cdots O hydrogen bonds, analogous to other *caines* such as benzocaine, procaine, and lidocaine. However, due to an imbalance between hydrogen-bond donors and acceptors, the preferred interaction landscape is not fully satisfied. Nevertheless, tetracaine exhibits an unexpectedly high lattice energy of $-163.15 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, arising largely from dispersive interactions. This finding is consistent with the low aqueous solubility of tetracaine, yet contrasts with its relatively low melting point of 314 K.

We analyzed crystal structure of tetracaine with respect to intermolecular interactions and molecular conformation in order to rationalize its physicochemical properties. In addition, the crystal structures of the pure compound and its hydrochloride salt are compared, with particular emphasis on the effect of protonation of the tertiary amine nitrogen on the overall crystal packing.

Literature

- [1] W. Li et al., *Conf. Ser.: Earth Environ. Sci.*, **64** (2017) 012108.
- [2] M. Kaźmierczak, E. Patyk-Kaźmierczak, *Cryst. Growth Des.*, (2026). DOI: 10.1021/acs.cgd.6c00587

NOVEL METAL COMPLEXES OF DIMETRIDAZOLE

Valeryia Hushcha^{1,3}, Urszula Kalinowska-Lis², Lilianna Chęcińska³

¹ *University of Lodz Doctoral School of Exact and Natural Sciences, ul. Narutowicza 68, 90-136 Lodz*

² *Medical University of Lodz, Faculty of Pharmacy, Muszyńskiego 1, 90-151 Lodz*

³ *University of Lodz, Faculty of Chemistry, ul. Pomorska 163/165, 90-236 Lodz*

Many currently available antibiotics can act as ligands capable of coordinating metal ions and forming new complexes with modified bioavailability, membrane permeability and intracellular distribution compared to the free ligand itself [1]. The emergence of various forms of resistance to antibacterial and antifungal drugs has become a global problem, as many commonly used antimicrobials have proven ineffective in the treatment of disseminated bacterial infections [2]. Intensive and inappropriate use of antibiotics is considered a major factor contributing to the emergence of numerous pathogens that have evolved into multidrug-resistant forms [3]. Given the growing challenges associated with resistance to conventional antibiotics, increasing attention has recently been devoted to the development of alternative antimicrobial agents.

Silver is a metal of considerable importance in medicinal chemistry, as its simple salts, nanoparticles, and complexes have been used as antiseptics [4], antimicrobial agents [5], and anti-inflammatory agents [6], while demonstrating acceptable toxicity toward human cells. Silver(I) ions administered in the form of complexes have been shown to provide long-lasting and effective antimicrobial activity, capable of preventing microbial proliferation and recolonization.

Experimental evidence indicates that Ag(I) complexes with weaker Ag–O and Ag–N bonds exhibit more potent antimicrobial activity than those with the stronger Ag–P and Ag–S bonds [7]. In the light of the biological importance of Ag(I) complexes, the synthesis of biologically active and less toxic silver complexes has attracted considerable attention.

In this study, new polymorphic forms of silver(I) nitrate complexes of dimetridazole are reported. The complexes were synthesized using different stoichiometric ratios, and the post-reaction conditions as slow evaporation temperatures were varied. These parameters resulted in structural differences among three polymorphic crystal forms. Additionally, copper(II) nitrate and zinc(II) nitrate complexes with dimetridazole were synthesized and characterized as part of this project.

Literature

- [1] E. Guney, V. T. Yilmaz, O. Buyukgungor, *Inorg. Chem. Comm.*, **13** (2010) 563–567.
- [2] S. Harbarth, U. Theuretzbacher, J. Hackett on behalf of the DRIVE-AB consortium, *J. Antimicrob. Chemother.*, **70** (2015) 1604–1607.
- [3] T. M. Barbosa, S. B. Levy, *Drug Resist.*, Update 3 (2000) 303–311.
- [4] G. McDonnell, A. D. Russell, *Clin. Microbiol. Rev.*, **12** (1999) 147–179.
- [5] F. W. Fuller, *J. Burn Care Res.*, **30** (2009) 464–470.
- [6] B. S. Atiyeh, M. Costagliola, S. N. Hayek, S. A. Dibo, *Burns.*, **33** (2007) 139–148.
- [7] T. Dai, Y. Y. Huang, S. K. Sharma, J. T. Hashmi, D. B. Kurup, M. R. Hamblin, *Recent Pat. Antiinfect. Drug Discov.*, **5** (2010) 124–151.

NEW MULTICOMPONENT NORFLOXACIN CRYSTALS WITH N-HETEROCYCLIC COFORMERS – SOLUBILITY ANALYSIS AND BIOLOGICAL ACTIVITY ASSESSMENT

Anna Ben^{1,2}, Aleksandra Felczak³, Katarzyna Kurpet¹, Lilianna Chęcińska¹

¹ University of Lodz, Faculty of Chemistry, st. Pomorska 163/165, 90-236 Lodz

² University of Lodz Doctoral School of Exact and Natural Sciences,
st. Jana Matejki 21/23, 90-237 Lodz

³ University of Lodz, Faculty of Biology and Environmental Protection,
st. Banacha 12/16, 90-237 Lodz

Fluoroquinolone antibiotics play a pivotal role in human and veterinary medicine and are listed among the World Health Organization's essential medicines. Norfloxacin, a first-generation fluoroquinolone, possesses broad antimicrobial activity, however, its clinical application is limited by poor aqueous solubility and low permeability, which hinder conventional pharmaceutical formulation [1].

Our project aims to overcome these limitations through crystal engineering, focusing on the design and synthesis of novel multicomponent pharmaceutical crystals of norfloxacin with N-heterocyclic coformers. The selection of heterocycles is strategic, as they offer diverse physicochemical properties, including hydrogen-bonding functionality and potential biological activity, which may improve solubility and enhance the effectiveness of norfloxacin in treating various bacterial infections.

The antimicrobial activity of the obtained solids will be evaluated against both Gram-positive and Gram-negative bacteria, including *Staphylococcus aureus* and *Pseudomonas aeruginosa*. *S. aureus* is responsible for a wide range of infections, ranging from skin and wounds colonization to severe life-threatening diseases such as bacteremia, pneumonia or endocarditis [2]. *P. aeruginosa* is a frequent cause of skin and wounds infections as well as urinary and respiratory infections [3]. Both microorganisms are major contributors to numerous community- and hospital-acquired infections, thus posing a serious threat to public health worldwide. Notably, methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* and carbapenem-resistant *Pseudomonas aeruginosa* strains were recognized by the WHO in the year 2024 as priority bacterial pathogens and classified as high-risk microorganisms [4]. Additionally, cytotoxicity studies using mammalian cell lines are planned, as an effective antimicrobial agent should combine high antibacterial activity with low cytotoxicity towards host cells.

Literature

- [1] A. Gunnam, A. K. Nangia, *Cryst. Growth Des.*, **23** (2023) 4198–4213.
- [2] S. E. Rowe, J. E. Beam, B. P. Conlon, *Infect. Immun.*, **89** (2021) 1110–1128.
- [3] S. J. Wood, T. M. Kuzel, S. H. Shafikhani, *Cells*, **12** (2023) 199.
- [4] World Health Organization. WHO bacterial priority pathogens list, (2024).

This work has been financially supported by University of Lodz (grant No. 15/IGB/2025). We thank Ms. Valeryia Hushcha (University of Lodz, Poland) for the support in syntheses. We are also grateful to Prof. Sean Parkin (University of Kentucky, USA) for the fruitful discussions and his help with challenging structure refinements, and Dr. Michał Gacki (Lodz University of Technology, Poland) for thermal analyses of multicomponent samples.

BADANIA STRUKTURALNE KOKRYSTAŁÓW KWASU GALUSOWEGO

Wiktoria Obijalska, Agnieszka Joanna Rybarczyk-Pirek

Katedra Chemii Fizycznej, Zakład Chemii Teoretycznej i Strukturalnej, Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki

Kwas galusowy jest organicznym związkiem z grupy kwasów fenolowych, który dzięki obecności trzech grup hydroksylowych oraz grupy karboksylowej pełni rolę donora i akceptora wiązań wodorowych, co czyni go dogodnym układem do projektowania struktur supramolekularnych [1]. Niska rozpuszczalność oraz słaba biodostępność tego związku ograniczają jego praktyczne zastosowanie farmaceutyczne [2], dlatego poszukuje się nowych form krystalicznych, takich jak kokryształy, w celu poprawy tych parametrów fizykochemicznych [3]. Wybór odpowiednich koformatorów, wsparty przeszukiwaniem bazy Cambridge Structural Database (CSD) [4], pozwala na tworzenie uporządkowanych sieci wiązań wodorowych oraz modyfikację właściwości substancji aktywnej (API) bez zmiany jej struktury chemicznej [5].

Celem pracy było otrzymanie nowych kokryształów kwasu galusowego oraz analiza wpływu doboru koformera i warunków krystalizacji na motywy oddziaływań międzycząsteczkowych. Kokryształy otrzymano metodami powolnego odparowania rozpuszczalnika, dyfuzji par oraz mechanosyntezy [6], a następnie scharakteryzowano je za pomocą rentgenowskiej analizy strukturalnej [7]. Uzyskane wyniki wskazują na różnice w sposobie organizacji sieci krystalicznej oraz charakterze oddziaływań niekowalencyjnych w zależności od zastosowanej metody syntezy i rodzaju partnera krystalizacji [8].

Literatura

- [1] R. Badheshia, M. Patel, A. Shah, Gallic acid cocrystals: An overview of preparation, characterization and pharmaceutical applications. *Journal of Drug Delivery Science and Technology*, **74** (2022) 103565.
- [2] I. Fernandes, M. Pérez-Gregorio, N. Mateus, V. de Freitas, Gallic Acid: Bioavailability and Bioactivities. *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, **17**(14) (2017) 1358–1365.
- [3] I. Sathisaran, S. V. Dalvi, Engineering cocrystals of gallic acid to enhance its solubility and dissolution rate. *CrystEngComm*, **19**(44) (2017) 6641–6652.
- [4] C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, The Cambridge Structural Database. *Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials*, **72**(2) (2016) 171–179.
- [5] N. Schultheiss, A. Newman, Pharmaceutical cocrystals and their physicochemical properties. *Crystal Growth & Design*, **9**(6) (2009) 2950–2967.
- [6] T. Friščić, W. Jones, Benefits of cocrystallization in pharmaceutical materials science: an update. *Journal of Pharmacy and Pharmacology*, **61**(8) (2009) 997–1007.
- [7] A. Karagianni, M. Malamataris, K. Kachrimanis, Co-amorphous systems via mechanochemical activation: An alternative to cocrystals for improving solubility of poorly water-soluble drugs. *Molecules*, **23**(5) (2018) 1165.
- [8] D. Braga, F. Grepioni, L. Maini, L. Chelazzi, Crystal engineering with crystals: solid–state synthesis and polymorphism. *Theoretical Chemistry Accounts*, **125** (2010) 413–424.

PLAKATY – SESJA B
POSTERS – SESSION B

B-1

X-RAY CRYSTAL STRUCTURE OF THE FUNGAL NITRATE ACTIVATOR NirA AND FUNCTIONAL IMPLICATIONS

Julia Kamysz^{1*}, Thomas Svoboda^{2*}, Barbara-Veronika Stauber², Joseph Strauss², Anastassios C. Papageorgiou¹

¹ *Turku Bioscience Centre, University of Turku and Åbo Akademi University, Turku 20521, Finland*

² *Microbial Genetics, BOKU University, Konrad Lorenz-Straße 24, 3430 Tulln an der Donau, Austria*

**These authors contributed equally to the presented work.*

The model ascomycete *Aspergillus nidulans*, as most fungi, can utilize nitrate as a source of nitrogen for growth by converting it to ammonium which is then incorporated into amino acids. Key components of this metabolic pathway are nitrate transporters, nitrate reductase (*niaD*) and nitrite reductase (*niirA*). In the presence of nitrate, the pathway is activated by the NirA protein – encoded by *nirA* (gene no. AN0098 in *A. nidulans*) – which binds to promoter elements of the pathway genes and subsequently recruits the transcriptional machinery.

NirA is a multidomain protein consisting of a nuclear localization signal domain (NLS), a binuclear Zn-cluster DNA-binding domain (DBD), a nuclear export signal domain (NES), a nitrate responsive domain (NiRD), and an activation domain (AD). To better understand the function of NirA and its activation mechanism, its crystal structure was determined [1,2].

A NirA construct that included the NES, NiRD, and AD domains was expressed, heterologously in *E. coli* as a 6xHIS fusion protein, purified, and crystallized. X-ray data to 2.3 Å resolution were collected using synchrotron radiation. The protein was found to crystallize with 10 copies in the asymmetric unit. Initial phases were determined by molecular replacement using an AlphaFold model. Analysis of the arrangement of the NirA molecules in the crystal identified a possible functional dimer (Fig. 1). The structural arrangement of the different NirA functional domains were also identified.

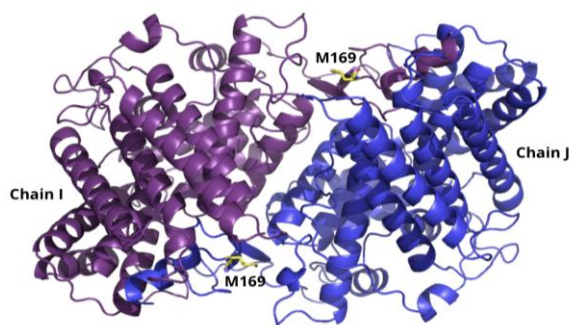


Fig. 1. NirA dimer. The I and J subunits of the NirA decamer are shown in violet and blue, respectively. M169, a residue involved in NirA activation, is shown in yellow in ball-and-stick representation.

Literature

- [1] A. Bernreiter et al., *Mol. Cell. Biol.*, **27** (2007) 791–802. DOI: 10.1128/MCB.00761-06
- [2] A. Gallmetzer et al., *PLoS Genet.*, **11** (2015) e1005297. DOI: 10.1371/journal.pgen.1005297

ANALIZA STRUKTURALNA CZĄSTECZEK RNA ZAWIERAJĄCYCH POWTÓRZENIA AAGG ZWIĄZANE Z PATOGENEZĄ ZESPOŁU ATAKSJI MÓZDŻKOWEJ, NEUROPATII ORAZ AREFLEKSJI UKŁADU PRZEDSIONKOWEGO

Jagoda Jerzy^{1,2}, Martyna Mateja-Pluta¹, Agnieszka Kiliszek¹

¹ *Instytut Chemii Bioorganicznej Polskiej Akademii Nauk, Zakład Badań Strukturalnych
RNA, ul. Zygmunta Noskowskiego 12/14, 61-704, Poznań*

² *Uniwersytet Przyrodniczy w Poznaniu, ul. Wojska Polskiego 28, 60-637 Poznań*

W komórkach rola RNA znacznie wykracza poza przekazywanie jedynie informacji genetycznej. Niezwykle ważnym aspektem jest jego zdolność do przyjmowania skomplikowanych konformacji przestrzennych, które bezpośrednio regulują liczne procesy biologiczne. Przykładem takich struktur mogą być G-kwadrupeksy RNA czyli wysoce stabilne, niekanoniczne struktury drugorzędowe, które formują się w regionach mRNA bogatych w reszty guanozyny [1]. W przypadku zespołu ataksji mózdkowej, neuropatii oraz arefleksji układu przedstonkowego (CANVAS) i pokrewnych chorób neurodegeneracyjnych głównym podłożem genetycznym jest patologiczna ekspansja motywów pentanukleotydowych (AAGGG) zlokalizowanych w drugim intronie genu RFC1, które mogą tworzyć stabilne struktury G-kwadrupeksów [2,3]. Wyznaczenie struktur trójwymiarowych powyższych kwadrupeksów jest niezwykle istotne dla projektowania nowych strategii terapeutycznych [2].

Celem niniejszych badań jest wyznaczenie struktury krystalicznej RNA powtórzeń A₂G₃ oraz ich ewaluacja biofizyczna przy pomocy m.in. rozdziału cząsteczek w żelu poliakrylamidowym w warunkach niedenaturujących (PAGE) czy dichroizmu kołowego.

Pierwszym etapem badań było zaprojektowanie i syntetyzowanie szeregu konstruktów RNA zawierających powtórzenia AAGG. Następnie przeprowadzono przesiewową krystalizację metodą siedzącej kropli z dyfuzją par, aby zidentyfikować warunki niezbędne do otrzymania odpowiednich kryształów do pomiarów dyfrakcyjnych. Po zidentyfikowaniu wstępnych warunków krystalizacyjnych, przeprowadzono optymalizację krystalizacji i otrzymano kryształy, które zostaną użyte do pomiarów synchrotronowych. Przeprowadzono również rozdział elektroforetyczny cząsteczek RNA w warunkach natywnych (PAGE), aby zbadać wpływ jednowartościowych kationów Na⁺ i K⁺ oraz dwuwartościowych kationów Ca²⁺ na homogenność strukturalną oraz zdolność cząsteczek do utworzenia struktur G-kwadrupeksów.

Literatura

- [1] T. Kamura et al., *Biochemical and Biophysical Research Communications*, **526**(1) (2020) 261–266. DOI: 10.1016/j.bbrc.2020.02.168
- [2] Yang Wang et al., *Nucleic Acids Research*, **52**(5) (2024) 2698–2710.
- [3] K. Kudo, K. Hori, S. Asamitsu, et al., *Journal of Biological Chemistry*, **300**(4) (2024) 107138. DOI: 10.1016/j.jbc.2024.107138

MODIFIED RNA OLIGONUCLEOTIDES AS STRUCTURAL TEMPLATES FOR IN SILICO PREDICTIONS: STRUCTURAL AND STABILITY EFFECTS OF PSEUDOURIDINE AND N1-METHYLPSEUDOURIDINE

Alena Dolińska^{1,2}, Martyna Mateja-Pluta¹, Antonina Gonet^{1,2}, Ryszard Kierzek¹, Agnieszka Kiliszek¹

¹ *Institute of Bioorganic Chemistry Polish Academy of Sciences, Noskowskiego St. 12/14, Poznan*

² *Adam Mickiewicz University, Uniwersytetu Poznanskiego St. 6, 61-614, Poznan*

RNA plays a crucial role in many physiological cellular processes, including transcription, translation, and the regulation of gene expression. The functional diversity of RNA arises from its ability to adopt complex secondary and tertiary structures, as well as from the presence of numerous post-transcriptional nucleotide modifications [1]. The best-known modifications include pseudouridine (Ψ) – the most abundant isomeric form of uridine found in RNA – and its derivative N1-methylpseudouridine ($m^1\Psi$), which increase the ability of RNA to form hydrogen bonds and stabilize the helical structure [2-4]. These modifications have been shown to influence RNA folding, base-stacking interactions, and translation efficiency [5]. Furthermore, the successful use of $m^1\Psi$ in mRNA vaccines against SARS-CoV-2 highlights its biotechnological and therapeutic significance.

Thermodynamic and structural studies described in the literature indicate that the stabilizing effect of Ψ strongly depends on the sequence context, varying according to the type of base pair formed (Ψ -A, Ψ -G, Ψ -U, Ψ -C), its position within the double-stranded molecule, and the nature of neighboring Watson–Crick base pairs. Crystallographic analyses have shown that although the overall A-form helix is preserved, Ψ can subtly modulate the local geometry, providing additional stabilization compared with uridine [6].

The aim of this study was to evaluate the effect of pseudouridine (Ψ) and N1-methylpseudouridine ($m^1\Psi$) on the thermodynamic stability and structure of short model RNA molecules. In this work, RNA oligonucleotides containing Ψ , $m^1\Psi$ modifications, and their unmodified counterparts, which served as reference sequences, were synthesized and purified. The thermodynamic stability of the studied oligomers was assessed based on the thermal denaturation of RNA duplexes monitored by UV spectroscopy. Thermodynamic parameters (ΔH , ΔS , and ΔG) were determined from the obtained melting curves using the MeltWin 3.5 software. The obtained results demonstrated that the presence of Ψ and $m^1\Psi$ significantly increases the thermodynamic stability of RNA, which was reflected by lower free energy (ΔG) values and higher melting temperatures (T_m) compared with their native counterparts. The stabilizing effect was clearly sequence-context dependent, confirming the key role of the local base environment in shaping RNA stability. Additionally, RNA crystallization screening was performed, enabling the evaluation of the crystallization potential of the studied sequences. The presence of the modifications had a beneficial effect on the crystallization process – the obtained crystals were characterized by appropriate size, regular shape, and high transparency, which enabled their use in diffraction measurements and further structural analyses.

Since crystallography remains one of the most powerful techniques for RNA structure analysis at atomic resolution, our study aimed to provide both thermodynamic parameters and structural information regarding the influence of nucleotide modifications on RNA stability. In the case of model RNA oligonucleotides, the analysis of these modifications allows for a better understanding of the mechanisms of intramolecular interactions and the relationship between structure and stability. The obtained results may also constitute valuable reference data supporting

B-3

the development of bioinformatic methods, particularly in the field of RNA structure modeling, as well as serve as a starting point for the design of more stable and functional RNA molecules with therapeutic potential.

Literature

- [1] R. Rodell, N. Robalin, N. M. Martinez, *Trends Biochem Sci*, **49** (2024) 12–27. DOI: 10.1016/j.tibs.2023.10.008
- [2] E. Westhof et al., *Structure*, **8**(3) (2000) R55–R65. DOI: 10.1016/s0969-2126(00)00112-x
- [3] H. Shi et al., *Mol Cancer* **19**(78) (2020). DOI: 10.1186/s12943-020-01194-6
- [4] M. Chastain et al., *Prog Nucleic Acid Res Mol Biol*, **41** (1991).
- [5] N. Dutta, I. Deb, J. Sarzynska, A. Lahiri, *Biophysics* (2023). DOI: 10.1101/2023.03.19.533340
- [6] E. Kierzek et al., *Nucleic Acid Res Mar*, **42**(5) (2014) 3492–3501. DOI: 10.1093/nar/gkt1330

B-4

PROTEIN FROM SNAKEHEAD FISH MUSCLE – ISOLATION AND CRYSTALLIZATION OF PARVALBUMIN

Ela Sulkifli^{1,2}, Zuzanna Kurek², Anna Bujacz²

¹ *Agricultural Science, Hasanuddin University, Makassar, 90245 Indonesia*

² *Institute of Molecular and Industrial Biotechnology, Faculty of Biotechnology and Food Sciences, Lodz University of Technology, ul. B. Stefanowskiego 2/22, 90-537 Łódź*

The snakehead fish (*Channa striata*) is a freshwater species widely distributed throughout South and Southeast Asia. It has long been recognized for its therapeutic benefits, particularly in accelerating post-surgical recovery and aiding postpartum health, primarily due to its high protein content. The protein fraction most commonly utilized from this species is the sarcoplasmic fraction. Recent studies have highlighted the multifaceted therapeutic potential of snakehead fish muscle proteins, including antibacterial, antioxidant and anti-inflammatory [1].

Previous findings suggest that the striatin fraction of snakehead fish specifically contributes to accelerated wound healing [2]. This fraction contains parvalbumin, a protein with a molecular weight of approximately 12 kDa. The active site of parvalbumin (comprising Asp18, Asp20, Ser22, Phe24, Glu26, and Glu29) is known to interact with TGF- β and NF- κ B, key regulators in the inflammatory pathway [3]. Despite its significance, structural data on fish parvalbumin remains limited and for snakehead fish, such data is currently non-existent.

This study focuses on the isolation and crystallization of parvalbumin from snakehead fish muscle. Isolation was achieved through gel filtration chromatography, while LC-MS analysis confirmed a homogeneous mass deconvolution profile with a prominent peak at 12,061 Da. Protein crystals were successfully obtained. These crystals are prepared for synchrotron X-ray diffraction to facilitate structure determination via molecular replacement and refinement. The results of this study are expected to make a significant contribution to the global structural database by providing an atomic model of snakehead fish parvalbumin, as well as serving as a basis for the development of its therapeutic potential.

Literature

- [1] R. Pervin, Md. A. Alam, N. Tasnim, S. Ahmed, M. B. Tanu, I. Parvez. *Aquaculture Reports*, **46** (2026) e103308.
- [2] P. Rahayu, F. Marcelline, E. Sulistyaningrum, M.T. Suhartono, R.R. Tjandrawinata. *Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine*, **6** (2016) 1001–1007.
- [3] A. Musliha, D. Dermawan, P. Rahayu, R. R. Tjandrawinata, *Heliyon*, **10** (2024) e38386.

B-5

CRYSTAL STRUCTURE, THERMODYNAMIC AND ENZYMATIC PROPERTIES OF *exo*- β -D-GLUCOSAMINIDASE FROM *PYROCOCCUS CHITONOPHAGUS*

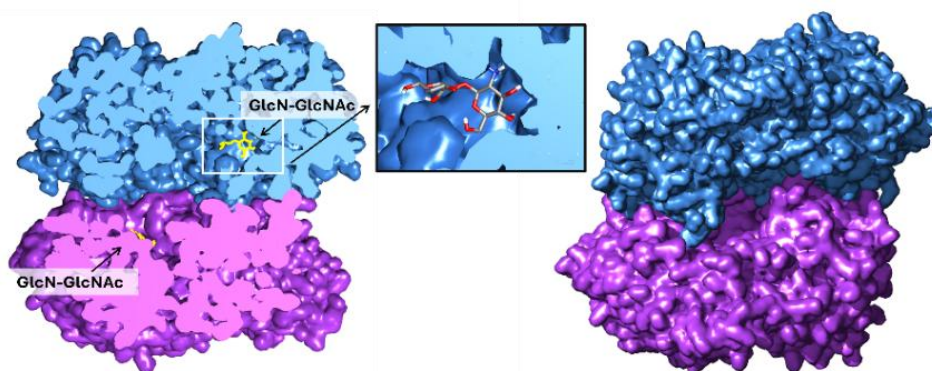
**Katarzyna Biniak-Antosiak¹, Daniel Baranowski¹, Joanna Śliwiak¹,
Mariusz Milik², Magdalena Bejger¹, Wojciech Rypniewski¹**

¹ Instytut Chemii Bioorganicznej PAN, ul. Z. Noskowskiego 12/14, 61-704 Poznań

² Kraków, Poland, mmilik@gmail.com

Chityna jest drugim najliczniej występującym biopolimerem po celulozie, może stanowić bogate źródło energii i makroelementów [1], w tym azotu – w przeciwieństwie do celulozy, która go nie zawiera, chityna jest nierozpuszczalna w wodzie i wysoce odporna na degradację. Do jej pełnego wykorzystania wymagany jest zestaw wyspecjalizowanych enzymów. Archeony i bakterie, a w mniejszym stopniu grzyby, to główne organizmy metabolizujące chitynę. Degradacja chityny u hipertermofilnych archeonów zachodzi z udziałem specyficznego szlaku enzymatycznego [2], w którym uczestniczą deacetylaza N,N'-diacetylochitobiozy (Dac) oraz *egzo*- β -D-glukozaminidaza (GlmA). W pracy przedstawiono charakterystykę strukturalną i funkcjonalną *egzo*- β -D-glukozaminidazy pochodzącej od hipertermofilnego archeonu *Pyrococcus chitonophagus* (Pch-GlmA).

Strukturę krystaliczną Pch-GlmA wyznaczono z rozdzielczością 2,1 Å (PDB: 8OUG) [3]. Enzym tworzy dimer z centralnie położoną kieszenią wiążącą substrat. Analiza strukturalna oraz dokowanie substratu wskazują na zachowujący mechanizm katalityczny z udziałem reszt Glu178 i Glu346 oraz specyficzne rozpoznawanie GlcN-GlcNAc.



Rys. 1. Powierzchniowa reprezentacja dimeru Pch-GlmA z widoczną centralną kieszenią wiążącą substrat. Podjednostki zaznaczono kolorami niebieskim i fioletowym, w kieszeni przedstawiona schematycznie wmodelowana cząsteczka substratu GlcN-GlcNAc.

Badania DSC i nanoDSF wykazały wysoką stabilność termiczną enzymu oraz obecność przejść konformacyjnych zależnych od temperatury. Pomiarzy aktywności enzymatycznej wykonane metodami ITC i NMR wykazały brak aktywności poniżej 75°C, natomiast w temperaturze 90°C zaobserwowano selektywną hydrolizę GlcN-GlcNAc.

B-5

Uzyskane wyniki potwierdzają proponowany mechanizm degradacji chityny u hipertermofilnych archeonów oraz dostarczają nowych danych dotyczących enzymów aktywnych w ekstremalnych warunkach temperaturowych [4].

Badania były współfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki (UMO-2017/27/B/NZ1/02201).

Literatura

- [1] G. W. Gooday, *Adv. Microb. Ecol.*, **11** (1990) 387–430.
- [2] T. Tanaka et al., *J. Biol. Chem.*, **279** (2004) 30021–30027.
- [3] K. Biniek-Antosiak et al., *Int. J. Mol. Sci.*, **23** (2022) 15736.
- [4] K. Biniek-Antosiak, D. Baranowski, J. Śliwiak, M. Milik, M. Bejger, W. Rypniewski, (w druku) *Journal of Structural Biology* (Manuscript ID: JSB-26-41).

SYNTHESIS, STRUCTURAL AND SPECTROSCOPIC CHARACTERIZATION OF ALKALI METAL, ALKALINE EARTH, OR TRANSITION METAL MELOXICAM COMPLEXES

Marta Brzezińska*, Katarzyna Helios, Rafał Petrus

*Faculty of Chemistry, Wrocław University of Science and Technology,
Smoluchowskiego 23, 50-370 Wrocław, Poland*

**e-mail: marta.brzezinska@pwr.edu.pl*

Meloxicam ($H_2Mel = 4\text{-Hydroxy-2-methyl-}N\text{-(5-methyl-2-thiazolyl)-2}H\text{-1,2-benzothiazine-3-carboxamide-1,1-dioxide}$) is a non-steroidal anti-inflammatory drug (NSAID) of the oxicam class, characterized by high selectivity toward cyclooxygenase-2 (COX-2) inhibition used in the treatment of inflammatory joint diseases [1].

In this work, we report the synthesis and comprehensive structural characterization of meloxicam complexes with alkali (Li^+ , Na^+ , K^+), alkaline-earth (Mg^{2+} , Ca^{2+}), and transition metal (Zn^{2+}) ions.

All reactions proceeded *via* selective deprotonation of the hydroxyl group of H_2Mel , affording the monoanionic $HMel^-$ ligand. Reactions of metallic lithium, sodium, and potassium with meloxicam in THF yielded the corresponding complexes: $[Li(HMel)(H_2O)_3] \cdot 0.68H_2O$ (**1**), $[Na(HMel)(\mu\text{-}H_2O)(THF)]_n$ (**2a**), $[Na(HMel)(H_2O)(THF)]^n$ (**2b**), and $[K(HMel)(H_2O)]_n$ (**3**). Treatment of H_2Mel with Mg^nBu_2 and $ZnEt_2$ afforded two complexes $[Mg(HMel)_2(EtOH)_2]$ (**4**) and $[Zn(HMel)_2(THF)_2]$ (**6**), while direct reaction with metallic calcium in methanol produced the $[Ca(HMel)_2(H_2O)_2]_n$ (**5**), as shown in Fig. 1.

The molecular and crystal structures of complexes **1-6** were determined by single-crystal X-ray diffraction, revealing diverse coordination modes and structural features of meloxicam, including different coordination geometries and donor interactions involving the $O_{(\text{carbonyl})}$, $O_{(\text{enolate})}$, $N_{(\text{thiazolyl})}$, and $S_{(SO_2)}$ atoms:

- the first example of monodentate coordination of $HMel^-$ *via* the carbonyl oxygen atom in complex **1**,
- in the sodium complexes **2a** and **2b**, different coordination polymers are formed – 2D and 1D networks, respectively – differing in the presence of a bridging H_2O molecule and the number of coordinated THF ligands,
- a unique potassium coordination environment involving bridging thiazole sulfur atoms and H_2O molecules in complex **3**,
- the first structurally characterized Mg^{2+} (**4**) and Ca^{2+} (**5**) meloxicam complexes,
- in the complex **6**, the Zn^{2+} ion is coordinated by the carbonyl oxygen atom and thiazolyl nitrogen atom, while two THF molecules occupy the axial positions.

Spectroscopic characterization by FTIR-ATR and Raman spectroscopy together with the 1H and ^{13}C NMR studies supported by $^1H\text{-}^1H$ COSY and $^1H\text{-}^{13}C$ HSQC experiments, enabled identification of the functional groups of the $HMel^-$ anions coordinated to M^+ or M^{2+} ions in complexes **1-6**. These results confirmed the coordination modes identified crystallographically.

B-6

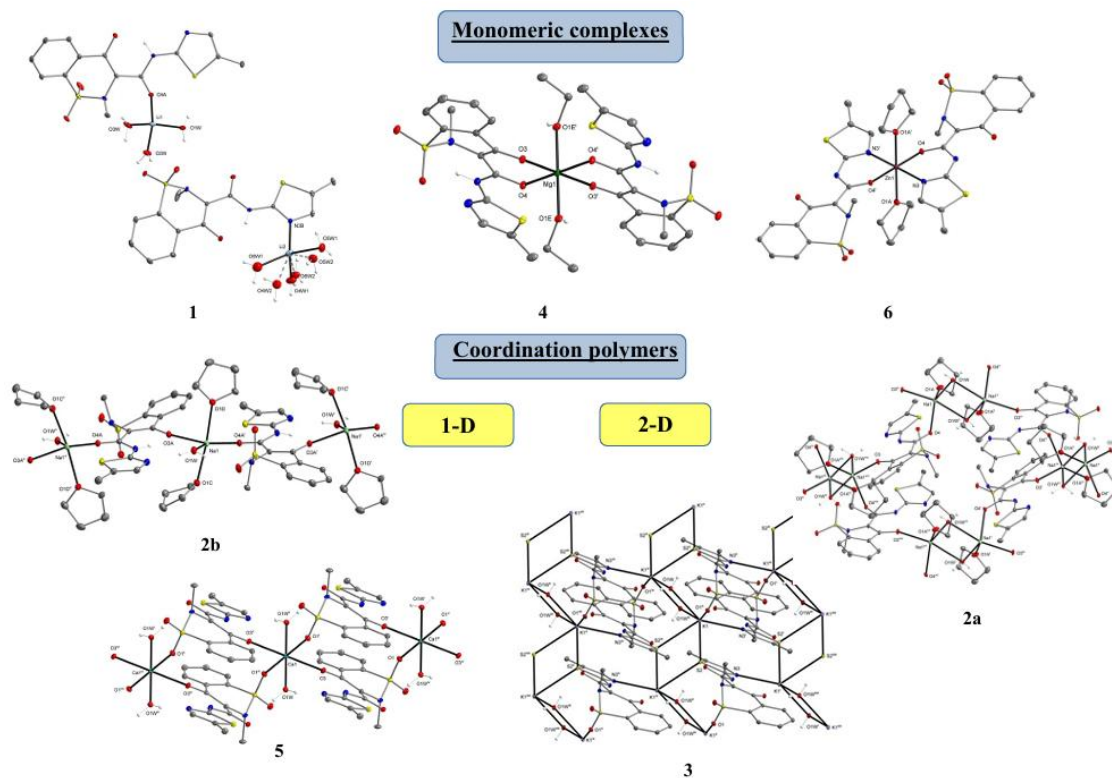


Fig. 1. Molecular structures of $[\text{Li}(\text{HMeI})(\text{H}_2\text{O})_3] \cdot 0.68\text{H}_2\text{O}$ (**1**), $[\text{Na}(\text{HMeI})(\mu\text{-H}_2\text{O})(\text{THF})]_n$ (**2a**), $[\text{Na}(\text{HMeI})(\text{H}_2\text{O})(\text{THF})]_n$ (**2b**), $[\text{K}(\text{HMeI})(\text{H}_2\text{O})]_n$ (**3**), $[\text{Mg}(\text{HMeI})_2(\text{EtOH})_2]$ (**4**), $[\text{Ca}(\text{HMeI})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ (**5**), and $[\text{Zn}(\text{HMeI})_2(\text{THF})_2]$ (**6**).

Literature

- [1] J. E. Weder, C. T. Dillon, T. W. Hambley, B. J. Kennedy, P. A. Lay, J. R. Biffin, H. L. Regtop, N. M. Davies, *Coord. Chem. Rev.*, **232** (2002) 95–126.

POLYMER MATRIX EFFECT ON FLUORESCENCE IN ELECTROSPUN FIBRES CONTAINING 4-CYANOPHENYLHYDRAZONE DYES

Paulina Sobczak-Tyłuś¹, Tomasz Sierański², Marcin Świątkowski², Beata Górską¹,
Dorota Zielińska¹, Anna Bednarowicz¹, Nina Tarzyńska¹, Karolina Gzyra-Jagiela¹,
Longina Madej-Kielbik¹, Agata Trzęsowska-Kruszyńska²

¹ *Lukasiewicz Research Network – Łódzki Institute of Technology, Marii Skłodowskiej-Curie 19/27, 90-570 Łódź, Poland*

² *Lodz University of Technology, Institute of General and Ecological Chemistry, Żeromskiego 116, 90-924 Łódź, Poland*

Designing organic emitters that retain intense fluorescence in the solid state requires control not only over molecular structure, but also over the way molecules are immobilized and spatially organized in a host environment. Electrospun polymer fibres are a convenient platform for such studies because they restrict dye mobility, separate chromophores and generate micro- and nanostructured morphologies suitable for functional materials [1,2].

Two phenylhydrazone-based fluorophores, namely (E)-4-(2-(4-(dimethylamino)benzylidene)hydrazinyl)benzonitrile and 4-((1E,2E)-3-phenylallylidene)hydrazinyl)benzonitrile, were introduced into polymer solutions based on poly(N-vinylpyrrolidone) and polystyrene. The materials were obtained by electrospinning, allowing the formation of fluorescent fibrous mats with different morphology, optical response and stability depending on the applied polymer matrix.

The obtained results showed that the polymer matrix plays a crucial role in controlling the behaviour of the incorporated dyes. Morphological analysis revealed clear differences between PVP- and PS-based fibres, while spectrofluorometric measurements confirmed that immobilisation of the fluorophores in polymer fibres modifies their emission properties compared with the pure compounds. In particular, changes in emission maxima and fluorescence intensity indicate that the local dye environment and dye-polymer interactions significantly affect the excited-state behaviour of the studied hydrazones.

Stability studies further demonstrated that the choice of polymer matrix determines the resistance of the materials to external factors, including aqueous conditions and elevated temperature. PS-based fibres provided improved resistance to dye leaching, whereas PVP-based systems showed very good thermal stability of fluorescence in the investigated temperature range.

These findings demonstrate that electrospun polymer fibres can serve not only as carriers for fluorescent organic dyes, but also as active matrices capable of modulating their optical properties and stability. The presented study highlights the importance of combining molecular design of solid-state fluorophores with appropriate material processing strategies for the development of functional fluorescent fibrous materials.

Literature

- [1] J. Mei et al., *Chem. Rev.*, **115** (2015) 11718.
[2] J. Xue et al., *Chem. Rev.*, **119** (2019) 5298.

INTERMOLECULAR INTERACTIONS AS MODULATORS OF OPTICAL PROPERTIES IN N-HETEROAROMATIC MODEL SYSTEMS

**Tomasz Sierański, Paulina-Sobczak-Tyłuś, Marcin Świątkowski,
Agata Trzęsowska-Kruszyńska, Igor Mossur**

*Institute of General and Ecological Chemistry, Lodz University of Technology,
Żeromski 114, 90-943 Łódź*

Intermolecular interactions play an essential role in shaping the optical properties of molecular materials, particularly in systems based on aromatic and heteroaromatic building blocks. In such compounds, the electronic response is not governed solely by the structure of an isolated molecule, but also by the mutual arrangement of neighboring molecules in the solid state. In this work, selected N-heteroaromatic model systems, including triazole isomers as well as quinoline and isoquinoline, were investigated in order to determine how aromatic stacking interactions influence their electronic structure and optical response.

The study focused on the relationship between intermolecular arrangement, orbital interactions and optical response. Natural Bond Orbital [1] analysis was applied to identify the donor–acceptor interactions responsible for the stabilization of the analyzed dimers, including $\pi \rightarrow \pi^*$, $\sigma(\text{C-H}) \rightarrow \text{ry}(\text{H})$, and $\sigma(\text{C-H}) \rightarrow \sigma(\text{C-H})$ contributions, where $*$ denotes an antibonding orbital and ry denotes a Rydberg orbital. These interactions were found to depend strongly on the topology of the heteroaromatic ring and on the position of nitrogen atoms within the molecular framework. In the case of quinoline and isoquinoline, extension of the π -electron system additionally modified the stacking landscape and affected the character of the electronic transitions.

The calculated optical spectra revealed that changes in intermolecular arrangement may lead to noticeable modifications of the optical response, including shifts of the spectral bands and changes in transition intensities. These effects can be associated with differences in orbital overlap, donor–acceptor interactions and the degree of electronic communication between stacked molecules. The results obtained from the Cambridge Structural Database [2] survey further confirmed that the investigated interaction motifs are relevant to real crystal structures containing N-heteroaromatic fragments.

Overall, this study shows that intermolecular interactions in N-heteroaromatic systems should be considered not only as structural and stabilizing factors, but also as important modulators of photophysical properties. The presented results provide insight into the relationship between molecular arrangement, orbital interactions and optical behavior, which may be useful for the rational design of functional organic materials with tunable absorption and emission properties.

Literature

- [1] A. E. Reed, L. A. Curtiss, F. Weinhold, *Chem. Rev.*, **88**(6) (1988) 899.
- [2] C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, *Acta Cryst. B*, **72**(Pt 2) (2016) 171.

SOLVENT-BASED SCREENING FOR TYROSINE KINASE INHIBITOR COCRYSTALS

Maciej Nowak, Anna M. Gólkowska, Marta Łoza, Bożena Karolewicz

Department of Drug Form Technology, Wrocław Medical University, Borowska 211a, 50-556 Wrocław

Cocrystallization of active pharmaceutical ingredients (APIs) has emerged as a rapidly advancing research area with both fundamental and translational significance. By selecting suitable coformers, cocrystallization enables the modulation of critical API properties, including solubility, bioavailability, and stability. Despite this, the mechanistic understanding of cocrystal formation remains limited. Most fundamental studies to date have focused on small model compounds (100–400 Da), whereas contemporary APIs increasingly exhibit larger molecular sizes and higher structural complexity, often coupled with reduced solubility [1]. While case studies exist for compounds exceeding 400 Da, systematic investigations addressing the general principles of cocrystallization for such molecules are still lacking.

The aim of the project was to conduct preliminary investigations focused on the discovery of new cocrystals of active pharmaceutical ingredients belonging to the class of tyrosine kinase inhibitors (TKIs), with particular emphasis on evaluating the influence of solvent properties on the course of the cocrystallization process. Over the past two decades, TKIs—of which the U.S. Food and Drug Administration (FDA) had approved more than 50 molecules, with approximately 60 additional candidates undergoing clinical trials—had revolutionized the pharmacotherapy of oncological and hematological diseases. However, these drugs were frequently characterized by low aqueous solubility and poor bioavailability, leading to substantial interindividual variability in plasma concentrations and, consequently, in pharmacological response and adverse effects. The average molecular weight of TKIs typically exceeded 500 Da and continued to increase, which rendered them particularly suitable candidates for the conducted cocrystal screening studies. The research was carried out using a model TKI, nilotinib (529.5 Da, 2 hydrogen bond donors, 9 hydrogen bond acceptors, 5 aromatic rings, and 6 rotatable bonds), as a representative compound for detailed investigation.

Out of 35 coformers with diverse structures and properties, cocrystals or cocrystal solvates were obtained with 26 acids using slurry crystallization, demonstrating the method's effectiveness as a high-throughput screening approach. Coformers yielding cocrystals were grouped as aliphatic acids, benzoic acid derivatives, and cinnamic acid derivatives. In the aliphatic group, 8 out of 10 acids formed cocrystals, with success generally associated with the presence of two carboxyl groups, whereas single-carboxyl or very short-chain acids failed. All tested benzoic acid derivatives produced cocrystals, while structurally similar compounds such as nicotinamide, isonicotinamide, and benzamide did not, indicating that at least one carboxyl group is essential for supramolecular synthon formation and crystal lattice stabilization. Among cinnamic acid derivatives, cocrystals were obtained with 3 of 4 coformers, suggesting that a hydroxyl group on the aromatic ring in addition to the carboxyl group is necessary for lattice stabilization.

Experimental parameters—including crystallization time, molar ratio, and solvent properties—significantly influenced outcomes. Extended crystallization times and higher NIL:coformer ratios (up to 1:2) often favored homogeneous phase formation. Solvent polarity and coformer solubility affected nucleation and promoted the formation of polymorphs or structures with different NIL:coformer stoichiometries. Ethanol and chloroform produced distinct crystalline outcomes, with some cocrystals forming in both solvents and others only in one, highlighting the role of solvent choice in directing crystallization outcomes.

Using the computational MCHBP [2] and MEP [3,4] methods, the cocrystal-forming potential of more than 100 different coformers was evaluated. The obtained results indicate a lack of correlation between these two approaches. For MCHBP, most experimentally tested coformers exhibited a positive potential for forming hydrogen bonds. This observation is consistent with the results obtained for carboxylic acids; however, the analysis did not exclude coformers for which no new cocrystals were obtained experimentally.

In the case of MEP, the calculated probabilities of cocrystal formation displayed a high degree of variability, with many values falling below 50%, including for some carboxylic acids. Nevertheless, in comparison with MCHBP, the MEP results suggest that this method provides better discrimination between coformers. Here, most coformers that did not form cocrystals under experimental conditions also exhibited low calculated probabilities of cocrystal formation.

Conclusions: Slurry crystallization is an effective method for identifying new cocrystals. In the screening studies, NIL cocrystals were obtained with 26 out of the 35 tested coformers. These coformers can be classified into three groups: aliphatic acids, benzoic acid derivatives, and cinnamic acid derivatives. The ability of coformers to form cocrystals with NIL depends on their molecular structure, particularly on the presence of a carboxyl group, which likely facilitates the formation of supramolecular synthons that stabilize the crystal lattice.

The cocrystallization process is influenced by several factors, including the stoichiometric ratio of the reagents, crystallization time, and the choice of solvent. By adjusting these parameters, it is possible to obtain cocrystals of high purity, as well as to access different polymorphic forms or structures with varying stoichiometries of the cocrystal components.

Funding: This work was carried out as part of the research project MINIATURA 9 No. 2025/09/X/ST4/00228 (MINI.D190.25.003), funded by the National Science Centre (Poland).

Acknowledgments

The computational results presented have been achieved using the Wrocław Centre for Networking and Supercomputing (grant No. 535).

Literature

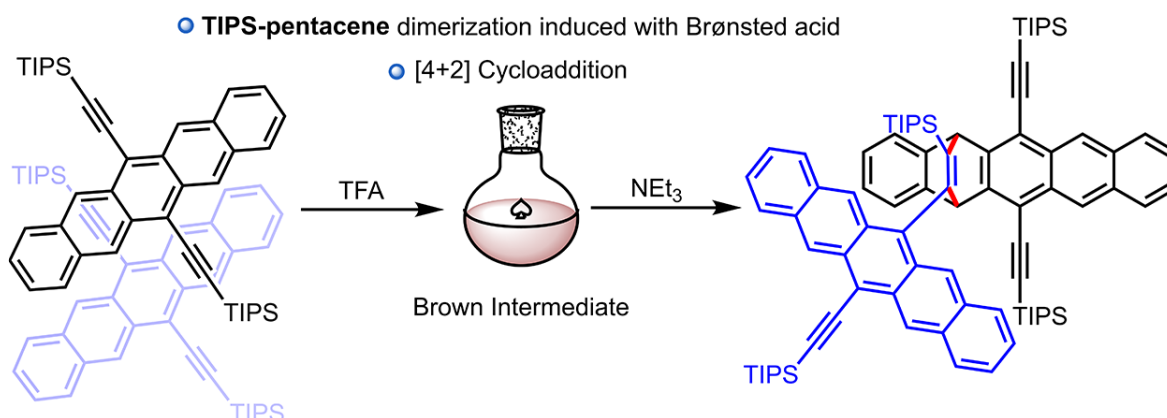
- [1] G. Karageorgis, J. J. Douglas, G. P. Howell., *Org Process Res Dev.*, **28**(8) (2024) 3339–46.
- [2] P. T. A. Galek, L. Fábíán, W. D. S. Motherwell, F. H. Allen, N. Feeder, *Acta Crystallogr B*, **63**(5) (2007) 768–82.
- [3] D. Musumeci, C. A. Hunter, R. Prohens, S. Scuderi, J. F. McCabe, *Chem Sci.*, **2**(5) (2011) 883.
- [4] Lu T., *J Chem Phys*, **161**(8) (2024) 082503.

ACID-MEDIATED DIMERIZATION OF TIPS-PENTACENE

Vishali Sharma¹, Paulina Bartos², Maja Morawiak¹, Przemysław Gawel¹¹ Institute of Organic Chemistry, Polish Academy of Sciences, ul. Kasprzaka 44/52, 01-224 Warsaw, Poland² Faculty of Chemistry, University of Łódź, ul. Tamka 12, 91-403 Łódź, Poland

Pentacene, built of five linearly fused benzene rings, exhibits high intrinsic hole mobility, favorable band dispersion, and relatively small reorganization energies [1] – features important in organic electronics. However, the use of unsubstituted pentacene in such devices poses many difficulties due to its poor solubility in organic solvents and a herringbone crystal packing motif that limits cofacial π – π overlap [2]. Installation of TIPS-ethynyl substituents at the 6,13-positions increases solubility by orders of magnitude, sterically shields the acene core, and biases crystallization toward a slipped cofacial “brickwork” motif [3]. Consequently, TIPS-Pc enables reproducible, solution processed organic field-effect transistors (OFETs) with high on/off ratios and high charge-carrier mobilities and serves as a benchmark material for correlating molecular design, packing, and charge/exciton dynamics.

In this communicate, we report that TIPS-Pc is susceptible to strong Brønsted acids such as trifluoroacetic acid (TFA). We show that TFA triggers dimerization of TIPS-Pc to give dimer 1. In the course of our studies, we observed that a CH₂Cl₂ solution of TIPS-Pc undergoes a distinct color change from deep blue to brown upon addition of TFA, similar to changes reported for electrochemical oxidation of TIPS-Pc (Scheme 1) [4].



Neutralization with triethylamine restored the blue color, suggesting a reversible process at first glance. However, thin layer chromatography (TLC) analysis revealed that the regenerated blue species was no longer TIPS-Pc but a different compound. Subsequent nuclear magnetic resonance (NMR) characterization revealed that this new species exhibited spectra identical to those of dimer 1, indicating that TFA treatment triggers an irreversible dimerization, despite the apparent visual reversibility of the color change, similar to the electrochemical dimerization reported by Speiser and coworkers [3].

B-10

Although both NMR and mass spectroscopy (MS) data supported the assignment of dimer 1, its structure was unambiguously confirmed by single-crystal X-ray diffraction (Figure 1).

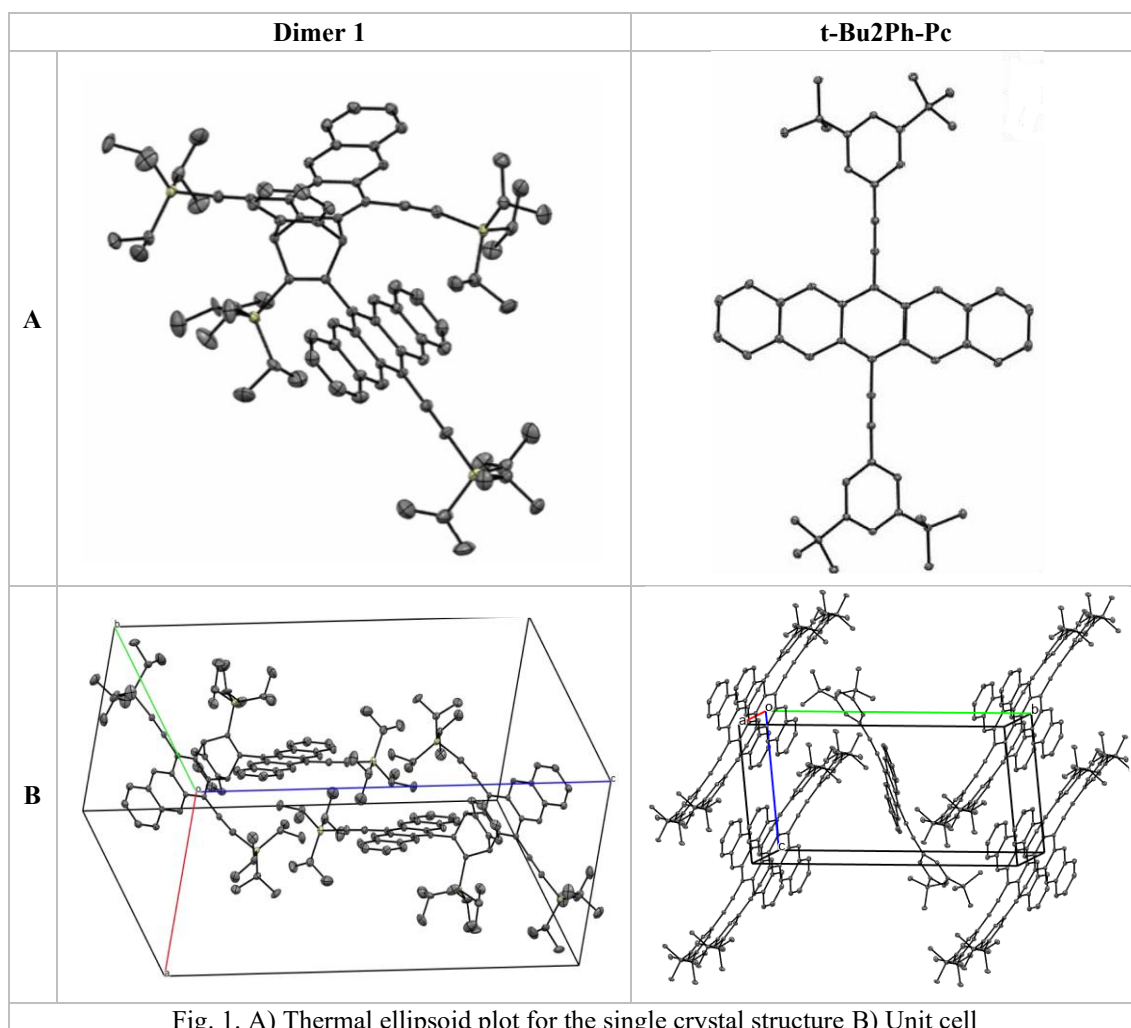


Fig. 1. A) Thermal ellipsoid plot for the single crystal structure B) Unit cell

In dimer 1 structure, the distance between the stacked anthracene planes is approximately 3.45 Å, indicating strong π - π interactions. The unreacted pentacene units are largely surrounded by TIPS groups and engage mainly in C-H \cdots π contacts. While t-Bu₂Ph-Pc crystallizes in two distinct domains in which the pentacene cores are tilted by approximately 47° relative to one another. Within each domain, the pentacene backbones adopt a slipped-stack arrangement.

Literature

- [1] J. E. Anthony, D. L. Eaton, S. R. Parkin, *Org. Lett.*, **4**(1) (2002) 15–18.
- [2] R. Ruiz, D. Choudhary, B. Nickel, T. Toccoli, K.-C. Chang, A. C. Mayer, P. Clancy, J. M. Blakely, R. L. Headrick, S. Iannotta, G. G. Malliaras, *Chem. Mater.*, **16**(23) (2004) 4497–4508.
- [3] J. E. Anthony; J. S. Brooks, D. L. Eaton, S. R. Parkin, *J. Am. Chem. Soc.*, **123**(38) (2001) 9482–9483.
- [4] S. Schundelmeier, C. Tonshoff, A. Gottler, R. Einholz, H. Schubert, H. F. Bettinger, B. Speiser, *J. Org. Chem.*, **88**(3) (2023) 1364–1377.

B-11

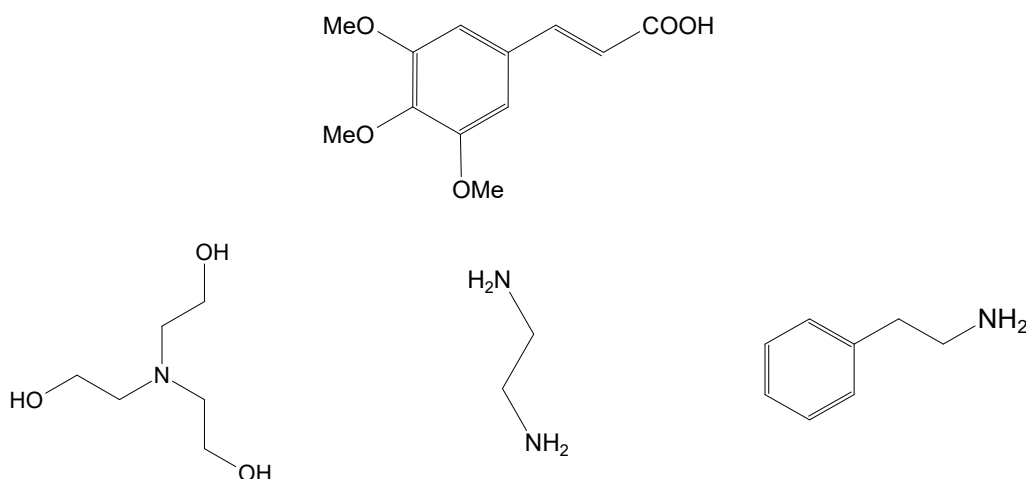
ANALIZA SIECI WIĄZAŃ WODOROWYCH W STRUKTURZE KWASU 3,4,5-TRIMETOKSYCYNAMONOWEGO I JEGO SOLACH Z AMINAMI

Antoni Krawiec¹, Błażej Dziuk², Krzysztof Ejsmont¹

¹ Instytut Chemii, Uniwersytet Opolski, ul. Oleska 48, 45-052 Opole

² Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska, Wybrzeże Wyspiańskiego 27,
50-370 Wrocław

Kwas cynamonowy i jego pochodne ulegają reakcji fotodimeryzacji zachodzącej w stanie stałym. Badania te zapoczątkowane ponad pół wieku temu nadal są kontynuowane. Skupiają się one przede wszystkim na poszukiwaniu korelacji pomiędzy sposobem upakowania cząsteczek w kryształach, a ich fotoreaktywnością. Jednym z warunków formułującym możliwość zajścia tej reakcji jest odległość między środkami grup reaktywnych, która powinna być około 4 Å oraz ich równoległe ułożenie względem siebie [1,2].



Rys. 1. Wzory strukturalne: kwasu 3,4,5-trimetoksy-cynamonowy oraz amin użytych do otrzymania badanych kryształów.

Struktura molekularna i krystaliczna kwasu 3,4,5-trimetoksy-cynamonowy i jego trzech soli: z trietanolaminą [3], etylenodiaminą [4] oraz fenyloetyloaminą (Rys. 1) została wyznaczona metodą dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego w temperaturze 100 K. Analiza sieci wiązań wodorowych oraz struktura przestrzenna badanych kryształów będzie stanowić treść zgłoszonego komunikatu plakatowego.

Literatura

- [1] G. M. J. Schmidt, *Pure Appl. Chem.*, **27** (1971) 647.
- [2] B. Ulambayar, C. Bariashir, K. Batchuluun, N. Uranbileg, F. J. Stammer, J. Davaasambuu, T. E. Schrader, *CrystEngComm*, **26** (2024) 4470.
- [3] D. Mootz, D. Brodalla, M. Wiebcke, *Acta Cryst. C*, **45** (1989) 754.
- [4] V. R. Thalladi, R. Boese, H.-C. Weiss, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **39** (2000) 918.

CHANGES IN CHEMICAL COMPOSITION AND CRYSTAL ORIENTATION IN THE COOLING BORES AREA OF SINGLE-CRYSTALLINE CORED TURBINE BLADES

Jacek Krawczyk*, Marcin Soczówka

*Institute of Materials Engineering, Faculty of Science and Technology,
University of Silesia in Katowice, 75 Pułku Piechoty 1a St., 41-500 Chorzów, Poland*

**e-mail: jacek.krawczyk@us.edu.pl*

Turbine engines in the aerospace industry are among the most complex machines. Engine components, such as turbine blades, operate at extremely high temperatures to meet increasingly stringent efficiency and economy standards. To prevent overheating, the blades are internally cooled by air that circulates through complex internal channels or bores. However, the complex shape and arrangement of these channels or bores cause various defects that form during directional crystallization, including chemical and orientation inhomogeneities. Today, turbine blades are most often produced of cobalt- or nickel-based superalloys. Superalloys are characterized by high mechanical strength, phase stability, resistance to oxidation, corrosion, and creep at high temperatures. The conditions for these properties are a low defect concentration and homogeneity of the dendritic microstructure, chemical composition, and crystal orientation.

The study aimed to measure the distribution of chemical elements and to analyze the dendritic structure and crystal orientation in the cooling bores area of selected blade fragments, in sections perpendicular and parallel to the withdrawal direction.

The analyzed single-crystalline cored turbine blades made of CMSX-4[®] superalloy were produced by directional crystallization using the Bridgman technique. The withdrawal rate was 3 mm/min. The assumed, preferred [001] crystal orientation was parallel to the blade withdrawal direction and the main vertical blade axis along which the primary dendrite arms have grown.

Chemical microanalysis was performed by scanning electron microscopy with energy-dispersive spectroscopy (SEM-EDS). The percentage atomic content of the chemical elements was analyzed in the areas near the cooling bores on several transverse and longitudinal sections of the blades. The quantitative distribution of chemical elements on section surfaces near the cooling bores was determined. The dendritic structure was observed by SEM imaging. The Laue diffraction was performed at selected points to analyze local crystal misorientation. The possible relations among changes in the morphology of the dendrite set, chemical composition, and crystal orientation in the cooling bore area were analyzed.

The presence of cooling bores in single-crystalline turbine blades causes local changes in the percentages of selected alloying elements, such as Ni, Al, Co, W, and Ta, near these bores. Changes in the percentages of other elements are negligible. The nature of chemical composition changes varies depending on the blade fragment and the distance from the blade selector extension (SE), initiating crystallization. The misorientation angle between the [001] crystal direction and the blade axis increased with increasing distance from the SE and cooling bores.

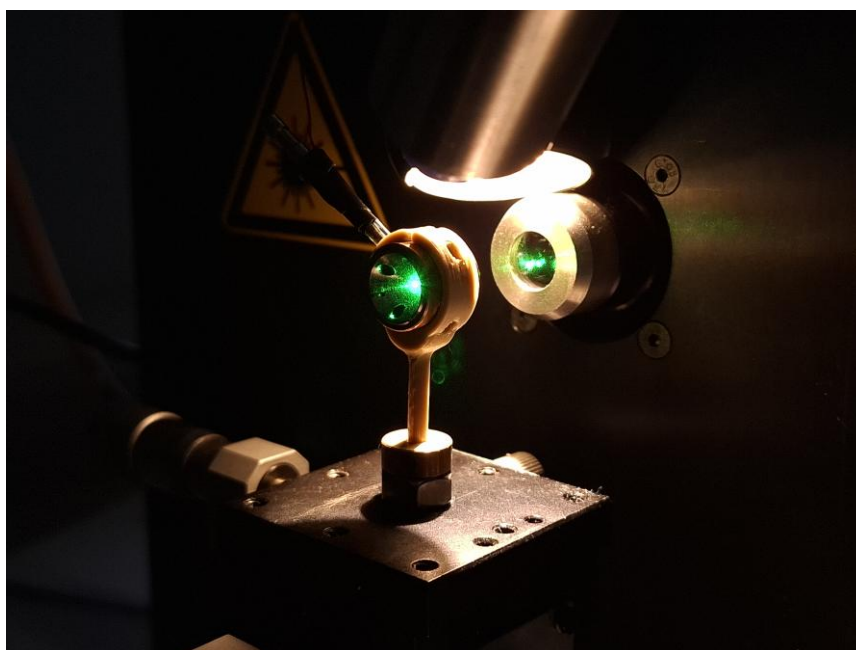
B-13

BADANIA WYBRANEGO KOMPLEKSU ZŁOTA(I) PRZY RÓWNOCZESNYM ZASTOSOWANIU NISKICH TEMPERATUR I ZWIĘKSZONEGO CIŚNIENIA

Paweł Grzymiski-Ostrega¹, Anna Makal¹, Jakub Wojciechowski²

¹ *Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, ul. Pasteura 1
02-093 Warszawa, Polska*

² *Rigaku Europe SE, 167 Hugenottenallee, 63263 Neu-Isenburg, Niemcy*



Rys. 1. Kowadełko TozerDAC.

Materiały molekularne o przełączalnych właściwościach fizykochemicznych są wysoce pożądane ze względu na szeroki zakres potencjalnych zastosowań. Kontrolowane przełączanie właściwości można osiągnąć poprzez indukowanie przemian fazowych monokryształu do monokryształu (SCSC) poprzez działanie zmienną temperaturę bądź podwyższonym ciśnieniem [1]. Równoczesne zastosowanie obu bodźców fizycznych stwarza możliwość badania faz krystalicznych w bardziej różnorodnych warunkach, obserwacji mechanizmów większej liczby przemian fazowych jak również potencjalnie zahamowania przemian niepożądanych. Eksperymenty przy równoczesnych zmianach p oraz T stanowią wyzwanie nawet w warunkach dedykowanych stacji synchrotronowych, a tym bardziej w warunkach laboratoryjnych.

W ramach prezentowanej pracy badano modelowy kompleks złota(I) o nazwie roboczej ArPet ((4-metoksyfenyloetynylo)(trietylofosfino)złoto(I)) [2]. Związek ten wykazuje liczne przemiany fazowe SCSC indukowane zarówno ciśnieniem jak i temperaturą. Celem pracy było zbadanie w warunkach laboratoryjnych (in-house) jak równoczesna zmiana obu parametrów termodynamicznych wpływa na strukturę związku. Wykorzystano miniaturowe diamentowe kowadełko ciśnieniowe

B-13

ze specjalnego brązu (TozerDAC) i opracowano protokół przeprowadzania takich badań.

Ze względu na konieczność szybkiego prowadzenia pomiarów (gromadzenie się szronu) wstępną serię pomiarów strukturalnych przeprowadzono w laboratorium demonstracyjnym Rigaku w z użyciem rotującej anody molibdenowej oraz srebowej.

W toku projektu sprawdzono efektywność obniżania temperatury w wyżej wymienionym kowadełku TozerDAC, przy użyciu nawiewowej przystawki temperaturowej, osiągając temperatury w kowadełku blisko 150 K. Otrzymano ciśnienia do prawie 2 GPa, korzystając z wysoko lotnego medium ciśnieniowego – mieszaniny n-pentan/izopentan w proporcjach, w których zachowuje dobre właściwości pseudo-hydrostatyczne w badanych warunkach [3].

Literatura

- [1] C. J. Ridley, K. V. Kamenev, *Z. Kristallogr.*, **229** (2014) 171.
- [2] R. Dziewiątkowska, J. Krzeszczakowska, M. Głodek, M. Łomzik, D. Plażuk, A. Makal, *Dalton Trans.*, **54** (2025) 3362.
- [3] S. Klotz, J. Philippe, E. Cochard, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **39** (2006) 1674.

TUNING THE ELECTRONIC BEHAVIOR OF P-PHENYLENEDIAMINE CHARGE-TRANSFER COMPLEXES VIA HIGH-PRESSURE

Shiva Batmanghelich, Szymon Sobczak, Andrzej Katrusiak

*Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8,
61-614 Poznań*

Organic charge-transfer (CT) complexes are highly sensitive systems with electronic behavior fundamentally governed by the balance between molecular ionization potentials, electron affinities, and intermolecular overlap [1]. Applying extreme hydrostatic pressure is a powerful experimental method to modulate intermolecular distances, thereby altering the electronic coupling between donor and acceptor molecules without changing their chemical composition.

Historically, pressure-induced electronic phenomena, such as resistance drops and neutral-to-ionic phase transitions, have been well-documented in solid-state derivatives of *p*-phenylenediamine (PPDA) and halogenated quinones [2,3]. This study aims to isolate specific electronic and steric substituent effects in three closely related CT complexes under extreme compression. We focus on the electronic behavior of the electron donor PPDA, co-crystallized with three structurally distinct electron acceptors: para-benzoquinone (*p*Bq), chlorobenzoquinone (Cl-*p*Bq), and methylbenzoquinone (Me-*p*Bq) (Figure 1). The solid-state complexes are subjected to hydrostatic pressures using a diamond anvil cell (DAC). In-situ UV-Vis absorption spectroscopy is utilized to probe the electronic transitions and monitor the structural evolution as a function of pressure.

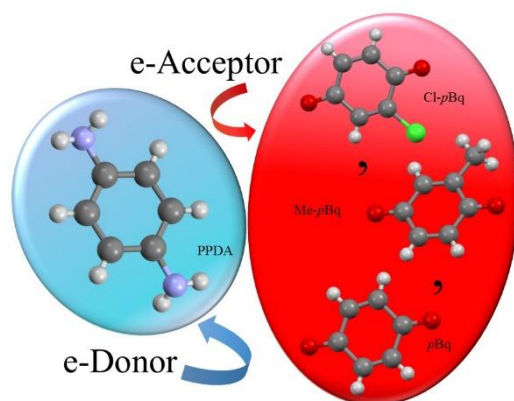


Figure 1. PPDA, co-crystallized with three electron acceptors: para-benzoquinone (*p*Bq), chlorobenzoquinone (Cl-*p*Bq), and methylbenzoquinone (Me-*p*Bq).

Literature

- [1] Y. Singh, *AIP Conference Proceedings.*, **1728** (2016) 020694.
- [2] W. H. Bentley, H. G. Drickamer, *The Journal of Chemical Physics*, **42** (1965) 1573–1587.
- [3] L. Farina, A. Brillante, M. Masino, A. Girlando, *Phys. Rev. B*, **64** (2001) 144102.

STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF SINGLE-GRAIN FLUX-GROWN AL-CU-FE QUASICRYSTALS

**Piotr J. Bardziński^{1,2}, Marek Weselski², Dagmara Kulesza², Paul D. Asimow³,
Jinping Hu³, Stephen Armstrong⁴, Daniel M. Silevitch⁴, Thomas F. Rosenbaum⁴,
Roger R. Fu⁵, Jerzy P. Goraus⁶, Kyle Hunady⁷, B. Fultz⁷**

¹ *Department of Semiconductor Materials Engineering, Faculty of Fundamental Problems of Technology, Wrocław University of Science and Technology, Poland*

² *Faculty of Chemistry, University of Wrocław, Wrocław, Poland*

³ *Division of Geological and Planetary Sciences, Caltech, Pasadena, CA, USA*

⁴ *Division of Physics, Mathematics and Astronomy, Caltech, Pasadena, CA, USA*

⁵ *Department of Earth & Planetary Sciences, Harvard University, Cambridge, MA USA*

⁶ *August Chelkowski Institute of Physics, University of Silesia, Chorzów, Poland*

⁷ *Division of Engineering and Applied Science, Caltech, Pasadena CA, USA*

Quasicrystals are a class of ordered solids that lack translational periodicity while exhibiting long-range orientational order and crystallographically forbidden symmetries, such as five-fold rotational symmetry [1,2]. Among these, face-centered icosahedral (F-type) quasicrystals, prevalent in Al-based alloys, feature hierarchical atomic arrangements built from distinct cluster types that vary with chemical composition [3]. Recent structural models reveal the coexistence of pseudo-Mackay and mini-Bergman clusters in F-type quasicrystals like Al-Pd-Cr-Fe, where 15 local configurations for pseudo-Mackay and 19 for mini-Bergman clusters emerge due to phason flips and linkage variations [4]. In Zn-Mg-Y systems, F-type phases follow τ -scaling in Bergman cluster arrangements, differing from the τ^3 -scaling in primitive (P-type) counterparts, with atomic density waves predicting reduced cluster overlap in F-type structures [5]. Alloy composition further drives cluster diversity, as evidenced in Ti-Zr-Ni icosahedral quasicrystals closely related to Laves phases with prominent tetrahedral sites [6].

In the current study, single grains of F-type Al-Cu-Fe quasicrystals were synthesized by means of the Al-flux growth method using the Canfield assembly [7,8]. Single-grain X-ray diffraction data were processed and integrated using the CrysAlis software package. The phase retrieval of the electron density from diffraction intensities was performed using the charge-flipping algorithm implemented in Superflip [9]. The real-space electron density reconstruction and subsequent analysis were carried out with dedicated MATLAB routines following the methodology of Buganski et al. [10]. The resulting electron density maps reveal that the investigated F-type Al-Cu-Fe quasicrystal is composed of two principal structural motifs: Mackay and pseudo-Bergman clusters, each with a characteristic diameter of approximately 36 Å. Atomic configurations were further determined using a custom Python-based approach, in which the reconstructed electron density was converted into a point-cloud representation and local maxima were identified via density-based clustering (DBSCAN) [11]. The centroids of these clusters were assigned as atomic positions, and local coordination environments were evaluated through efficient nearest-neighbor searches. Concentric atomic shells corresponding to Mackay and Bergman-type clusters were subsequently identified based on radial distance criteria, enabling statistical

B-15

characterization of atomic distributions and interatomic distances. Electron backscatter diffraction confirmed the presence of characteristic 2-, 3-, and 5-fold symmetry axes typical of icosahedral quasicrystals. Additional support for the quasiperiodic structure was provided by Mössbauer spectroscopy, which yielded hyperfine interaction parameters consistent with previously reported values for Al–Cu–Fe quasicrystals, indicating similar local electronic environments of Fe atoms [12].

Literature

- [1] D. Levine, P. J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.*, **53** (1984) 2477–2480.
- [2] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.*, **53** (1984) 1951–1953.
- [3] V. Elser, C. L. Henley, *Phys. Rev. Lett.*, **55** (1985) 577–580.
- [4] T. Yamada, H. Takakura, A. Yamamoto, *Acta Cryst. A*, **80** (2024) 422–438.
- [5] S. Nakamura, Y. Usui, K. Nakayama, A. Hirata, Y. Koyama, *Philos. Mag.*, **106** (2026) 552–570.
- [6] K. F. Kelton et al., *Phys. Rev. B*, **52** (1995) 13401–13404.
- [7] P. J. Bardziński, D. Kulesza, P. D. Asimow, J. Hu, S. Armstrong, D. M. Silevitch, T. F. Rosenbaum, *Phys. Rev. Mater.*, **9** (2025).
- [8] P. J. Bardziński, D. Kulesza, P. D. Asimow, J. Hu, S. Armstrong, D. M. Silevitch, T. F. Rosenbaum, J. P. Goraus, K. Hunady, B. Fultz, *Acta Mater.*, **311** (2026) 122177.
- [9] L. Palatinus, G. Chapuis, *J. Appl. Cryst.*, **40** (2007) 786–790.
- [10] I. Buganski et al., *Mater. Sci. Technol.*, **36** (2020) 989–995.
- [11] M. Ester, H.-P. Kriegel, J. Sander, X. Xu, *Proc. KDD*, (1996) 226–231.
- [12] J. Pelloth, R. A. Brand, F. Hippert, Y. Calvayrac, *Hyperfine Interact.*, **111** (1998) 229–237.

Acknowledgements

The research described was funded by the National Science Centre, Poland (NCN), research grant No. 2020/36/C/ST5/00007.

PHYSICOCHEMICAL ANALYSIS OF TABLETS PRINTED USING THE SELECTIVE LASER SINTERING TECHNIQUE

**Anna Mocarska¹, Marta Łaszcz¹, Karolina Pioruńska¹, Patrycja Chmielewska¹,
Magdalena Urbanowicz¹, Ewelina Baran², Piotr Kulinowski²**

¹ *Falsified Medicines and Medical Devices Department, National Medicines Institute,
30/34 Chelmska Street, 00-725 Warsaw, Poland*

² *Institute of Technology, University of the National Education Commission,
2 Podchorążych Street, 30-084 Cracow, Poland*

Selective laser sintering (SLS) is an additive manufacturing technology that is gaining increasing prominence in the pharmaceutical industry, with applications in the production of personalized drug forms. This approach makes it possible to obtain specific doses, shapes, and controlled release of the active ingredient [1].

The presented research examines the potential for multiple reuses of powders intended for 3D printing tablets using the SLS method. Formulations based on polyamide 12 (PA12) and metronidazole (Met) in both standard and granular forms with the addition of 5% PVP, were used as the research material. Metronidazole is an active substance with antibacterial and antiprotozoal properties, effective against anaerobic bacteria. The main goal of the study was to determine how successive printing cycles and powder reuse affect its physicochemical properties, structure, and process parameters, taking into account the reduction of waste generated during 3D printing [2,3], as well as which form of metronidazole would be most beneficial for the obtained results.

Material characterization was conducted using X-ray powder diffraction (XRPD), infrared spectroscopy (FT-IR), and differential scanning calorimetry (DSC). Both the starting material and the powders recovered after subsequent printing cycles – from the first to the fifth – were analyzed for both formulation variants containing metronidazole.

The results obtained so far indicate that repeated use of powders in the SLS process may be possible without significant deterioration of the material's process parameters. Differences were also visually observed in the surface morphology of prints containing standard and granulated metronidazole – formulations with granulated metronidazole were characterized by a less smooth surface. Additionally, an increased rate of active ingredient release was noted for formulations containing granulated metronidazole. These results suggest that granulation of the active ingredient may affect both the surface properties of the prints and the drug release profile. Further physicochemical studies are being conducted to fully assess the effect of granulation on the structure and stability of the materials.

Acknowledgement

This work was financed by the National Science Centre grant no. 2022/45/B/NZ7/04081.

Literature

- [1] D. A. Davis Jr., R. Thakkar, Y. Su, R. O. Williams III, M. Maniruzzaman, *J. Pharm. Sci.*, **110**(4) (2021) 1432.
- [2] L. Feng, Y. Wang, Q. Wei, *Polymers*, **11**(4) (2019) 727.
- [3] P. Kulinowski, P. Malczewski, M. Łaszcz, E. Baran, B. Milanowski, M. Kuprianowicz, P. Dorożyński, *Materials*, **15**(6) (2022) 2142.

BADANIA METODAMI PXRD, SEM-EDS & ICP-OES SKŁADU ŁUPKÓW POKOPALNIANYCH Z OKOLIC KROBICY ORAZ GIERCZYNA NA POGÓRZU IZERSKIM

**Andrzej Żarczyński, Anna Bajerowska, Waldemar Maniukiewicz,
Jakub Kubicki, Aleksandra Zimon, Ewa Bajerowska, Wojciech M. Wolf,
Małgorzata I. Szykowska-Jóźwik**

*Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej,
ul. Żeromskiego 116, 90-543 Łódź*

Region Sudetów Zachodnich, a w szczególności obszar Gór Izerskich i terenów przylegających, stanowi jeden z najbardziej unikalnych pod względem historycznym oraz geologicznym rejonów w Polsce. Ukształtowanie tego terenu jest ściśle związane z formowaniem się tzw. metamorfiku izerskiego. Szczególne miejsce w eksploatacji surowców mineralnych zajmuje złożo łupkowe występujące w rejonie miejscowości Krobica i Gierczyn. Dziś ten teren wyłączony z aktywnej eksploatacji przemysłowej stanowi miejsce, które interesuje zarówno geologów, jak i badaczy historii. Krajobraz tego regionu został trwale przekształcony przez działalność człowieka, czego przykładem są liczne hałdy i usypiska. W dzisiejszych czasach dawne pozostałości pokopalniane stają się obiektami edukacyjnymi i geoturystycznymi [1,2]. Przedmiotem badań były próbki materiału skalnego o charakterze łupków łuszczkowych, pochodzące z lokalnych usypisk pokopalnianych na Pogórzu Izerskim. Pobrano próbki łupków z okolic sztolni „Św. Leopold” w Krobicy oraz kopalni „Psi Grzbiet” we wsi Gierczyn. Głównymi celami badań były: analiza zawartości metali, zwłaszcza ciężkich oraz identyfikacja faz krystalicznych w zebranych łupkach [3].

Analizę zawartości pierwiastków wykonano stosując zaawansowane techniki instrumentalne: optyczną spektrometrię emisyjną ze wzbudzeniem w plazmie indukcyjnie sprzężonej (ICP-OES) oraz płomieniową, wysokorozdzielczą, absorpcyjną spektrometrię atomową z ciągłym źródłem promieniowania (HR-CS-FAAS). Fazy krystaliczne określono za pomocą rentgenowskiej dyfraktometrii proszkowej (PXRD), natomiast do określenia punktowego rozmieszczenia pierwiastków wykorzystano skaningową mikroskopię elektronową sprzężoną ze spektrometrią dyspersji energii promieniowania rentgenowskiego (SEM-EDS). Do badań składu fazowego stosowano dyfraktometr polikrystaliczny X'PERT PRO MPD firmy Malvern PANalytical, ze źródłem promieniowania $\text{CuK}\alpha$ uzyskiwanego w wyniku monochromatyzacji promieni X na filtrze niklowym. Ocenę składu fazowego badanych próbek wykonano przy pomocy programu X'Pert High Score (ver. 4.9) oraz bazy standardów proszkowych ICDD PDF2 (ver. 2024). Analizy zawartości metali wykonano metodą ICP-OES po uprzednim roztworzeniu próbek w wodzie królewskiej [3].

Rezultaty analiz wykazały podobieństwo w składzie i morfologii badanych łupków. Analiza PXRD i korelacja z wynikami SEM-EDS potwierdziły, że główną fazą krystaliczną łupków jest kwarc, któremu towarzyszą glinokrzemiany, zwłaszcza muskowit i klinochlor. Stwierdzono, że zawartość metali potencjalnie toksycznych (ołowiu, kobaltu, chromu i cyny) występowała na poziomie śladowym. Niskie stężenia metali ciężkich sugerują ograniczony potencjał migracji zanieczyszczeń, co oznacza,

B-17

że badane odpady pokopalniane nie stanowią zagrożenia dla środowiska gruntowo-wodnego. Znaczące stężenia glinu (Al), żelaza (Fe), potasu (K) i magnezu (Mg) są z kolei ściśle skorelowane z obecnością wymienionych minerałów, stanowiących główną masę łupków łuszczkowych. Ze względu na korzystny efekt wizualny i oporność na czynniki atmosferyczne, badane odpady po wstępnej selekcji jakościowej, mogą stanowić estetyczny materiał dekoracyjny wykorzystywany w budownictwie oraz ogrodnictwie.

Literatura

- [1] J. Głowacki, 2020, Kopalnia Św. Jana i Sztolnia Leopold w Krobicy, <https://paskonikstronik.blogspot.com/2020/09/kopalnia-sw-jana-i-sztolnia-leopold-w.html>, [dostęp: 10.02.2026].
- [2] M. Madziarz, Historical ore mining sites in Lower Silesia (Poland) as geo-tourism attraction, *Acta Geoturistica*, 4(1) (2013) 15–26.
- [3] A. Bajerowska, Analiza składu łupków pokopalnianych z okolic Krobicy (Góry Izerskie), praca inżynierska, IChOiE PŁ, Łódź 2026.

DERIVATION OF THE MAGNETIC LORENTZ FORCE VIA A UNIFIED APPROACH TO CLASSICAL AND RELATIVISTIC DYNAMICS FOR VARIABLE MASS SYSTEMS

Janusz Wolny, Radosław Strzałka, Ireneusz Bugański

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, AGH w Krakowie

Special relativity categorizes the description of physical phenomena based on the velocity of the objects involved. For velocities significantly lower than the speed of light in a vacuum a classical framework is employed; however, as velocities approach c , the description shifts to a relativistic one. The precise boundaries governing the applicability of these two approaches are often difficult to define. While magnetism is traditionally associated with relativistic effects, the velocities of moving charges in many practical scenarios remain within non-relativistic limits. Consequently, these phenomena frequently reside in the classical rather than the relativistic domain.

In this presentation, we introduce a novel approach to magnetism that reconciles these two distinct frameworks, establishing a universal description valid across the entire velocity spectrum [1,2]. Classically, this is achieved by treating the motion as that of a body with variable mass. The core relativistic principle integrated into this theory is mass-energy equivalence. Experimental evidence confirms that mass varies with motion, a factor that must be explicitly accounted for in the equation of motion. While variable mass equations are well-established—commonly used, for instance, to describe rocket propulsion—mass-energy equivalence is equally prevalent, appearing at the micro-scale in isotope production and at the macro-scale in stellar radiation.

By applying this unified dynamical framework to objects such as point charges, we utilize the governing equations of variable mass systems. From this, two distinct components emerge, one of which accounts for magnetism. This allows for the formal definition of the magnetic interaction as a fundamental consequence of the system's dynamics. Within three-dimensional physical space, the formulas for the magnetic induction vector and the Lorentz force are subsequently derived.

Literature

[1] J. Wolny, R. Strzałka, *Am. J. Phys. Appl.*, **8** (2020), 25.

[2] J. Wolny, R. Strzałka, *Nov. Res. Sci.*, **6** (2021), NRS.000630.2021.

PORZĄDEK POZYCYJNY W MIESZANINIE CIEKŁOKRYSTALICZNEJ BADANY Z UŻYCIEM DYFRAKCJI RENTGENOWSKIEJ, METODY ELEKTRO-OPTYCZNEJ I OBLICZEŃ DFT

**Aleksandra Deptuch¹, Michał Czerwiński², Mateusz Filipow², Mateusz Pączek³,
Ewa Juszyńska-Gałązka^{1,4}**

¹ Instytut Fizyki Jądrowej im. H. Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk,
ul. Radzikowskiego 152, 31-342 Kraków

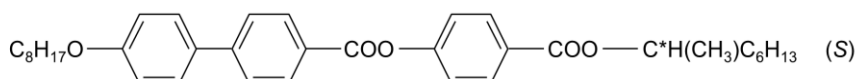
² Instytut Chemii, Wojskowa Akademia Techniczna, ul. Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa

³ Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

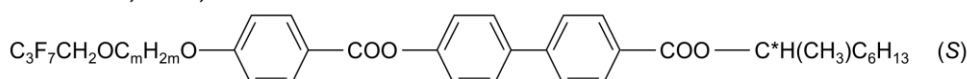
⁴ Research Center for Thermal and Entropic Science, Graduate School of Science,
Osaka University, 560-0043 Osaka, Japonia

Mieszanina ciekłokrystaliczna oznaczana jako MIX23HH6 powstała w wyniku zmieszania związków o akronimach MHPOBC, 3F2HPhH6 i 3F3HPhH6 w stosunku molowym 0.5 : 0.25 : 0.25 (Rys. 1). Sekwencja fazowa mieszaniny podczas ochładzania, otrzymana metodą różnicowej kalorymetrii skaningowej, to ciecz izotropowa (407.5 K) smektyk A* (396.9 K) smektyk C* (388.5 K) smektyk C_A* (309.3 K) smektyk X_A* (265.5 K) szkło smektyka X_A* [1]. Fazy smektyczne charakteryzują się uporządkowaniem warstwowym quasi-dalekiego zasięgu oraz uporządkowaniem bliskozasięgowym w warstwach; w fazie heksatycznej dodatkowo pojawia się uporządkowanie orientacyjne heksagonalnych domen wewnątrz warstw [2].

MHPOBC



3FmHPhH6, m = 2, 3

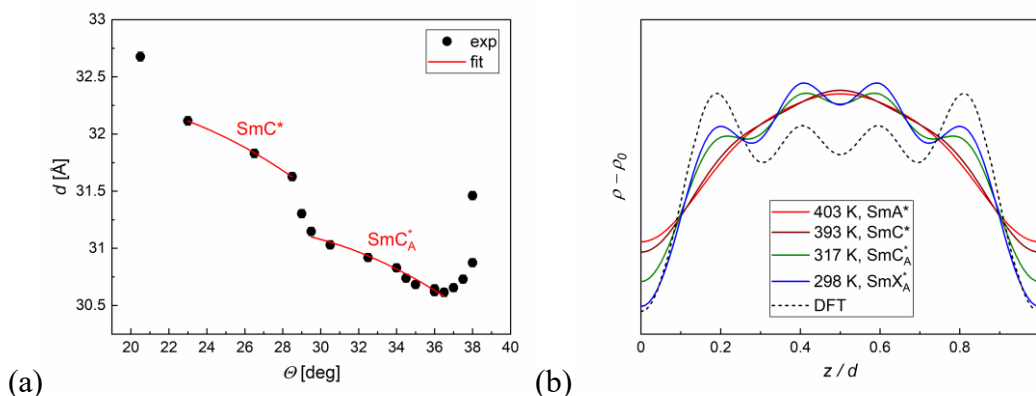


Rys. 1. Wzory strukturalne składników mieszaniny MIX23HH6 [1].

Wydłużone cząsteczki MHPOBC, 3F2HPhH6 i 3F3HPhH6 mogą przyjmować różne konformacje, często odbiegające znacząco od liniowego. W celu wyznaczenia średniej długości L i parametru nieliniowości $\delta\theta$ cząsteczek dokonano porównania grubości warstw smektycznych d wyznaczonej metodą dyfrakcji rentgenowskiej i kąta pochylenia cząsteczek θ otrzymanego metodą elektro-optyczną. Dopasowanie funkcji $d(\theta) = L \arccos(\theta - \delta\theta)$ daje wynik $L = 32.31(2) \text{ \AA}$, $\delta\theta = 16.7(2)^\circ$ w fazie SmC* oraz $L = 31.19(5) \text{ \AA}$, $\delta\theta = 25.2(5)^\circ$ w fazie SmC_A* (Rys. 2a). Dla porównania, średnie wartości dla modeli cząsteczek otrzymanych metodą DFT w programie Gaussian 16 [3] to $L = 31 \text{ \AA}$ oraz $\delta\theta = 25^\circ$, co wskazuje, że w mieszaninie MIX23HH6 nie zachodzi dimeryzacja cząsteczek.

B-19

Natężenia refleksów (00 l) związanych z uporządkowaniem warstwowym pozwalają na wyznaczenie centrosymetrycznego rozkładu gęstości elektronowej $\rho(z)$ w kierunku prostopadłym do warstw smektycznych w mieszaninie (Rys. 2b) i jej czystych składnikach. Wyniki obliczeń DFT dają jakościowo dobrą zgodność z eksperymentem dla MIX23HH6 w niskich temperaturach (< 350 K) oraz dla 3F2HPhH6 i 3F3HPhH6. Eksperymentalne rozkłady $\rho(z)$ dla MIX23HH6 w wyższych temperaturach i dla MHPOBC są bliższe prostej zależności sinusoidalnej, niż wynika z obliczeń DFT, co wskazuje na niskie wartości parametrów porządku warstwowego wyższego rzędu [4].



Rys. 2. Grubość warstw smektycznych vs. kąt pochylenia (a) i rozkład gęstości elektronowej (b) w mieszaninie MIX23HH6 [1].

Podziękowania: Dziękujemy dr hab. inż. Magdalenie Urbańskiej z Wojskowej Akademii Technicznej za przeprowadzenie syntezy. A. Deptuch dziękuje Narodowemu Centrum Nauki za wsparcie finansowe w ramach grantu MINIATURA 7 nr. 2023/07/X/ST3/00182. M. Czerwiński i M. Filipow dziękują Wojskowej Akademii Technicznej za wsparcie finansowe w ramach grantu UGB 22-094. Obliczenia DFT zostały przeprowadzone w ramach grantu obliczeniowego infrastruktury PLGrid nr. PLG/2026/019109 w Akademickim Centrum Komputerowym Cyfronet AGH.

Literatura

- [1] A. Deptuch, A. Drzewicz, M. Piwowarczyk, M. Czerwiński, M. Filipow, M. Pączek, E. Juszyńska-Gałązka, arXiv (2006) <https://doi.org/10.48550/arXiv.2604.13653>.
- [2] D. Demus, J. Goodby, G.W. Gray, H.-W. Spiess, V. Vill (edytorzy), *Handbook of Liquid Crystals*, WILEY-VCH Verlag GmbH, Weinheim (1998).
- [3] Gaussian 16, Revision C.01, M. J. Frisch et al., Gaussian, Inc., Wallingford CT (2019).
- [4] Y. Takanishi, A. Ikeda, H. Takezoe, A. Fukuda, *Phys. Rev. E*, **51** (1995) 400–406.

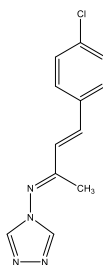
**STRUKTURA KRYSTALICZNA POLIMERU
Koordynacyjnego MIEDZI(I) Z ZASADĄ SCHIFFA
WYKAZUJĄCA ODDZIAŁYWANIE KUPROFILOWE
(Cu(I)⋯Cu(I))**

Martyna Wojciechowska, Emilia Ganczar

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

W chemii związków koordynacyjnych wykorzystuje się kombinację różnorodnych ligandów organicznych z centrami metalicznymi w celu konstrukcji zarówno układów dyskretnych jak i jedno- lub wielowymiarowych polimerów koordynacyjnych [1]. W wyniku prostych reakcji bardzo często dochodzi do otrzymania więcej niż jednej formy krystalicznej o odmiennych właściwościach strukturalnych [2]. Ligandy wykazujące tendencję do tworzenia mostków koordynacyjnych znajdują szerokie zastosowanie w chemii koordynacyjnej, między innymi dlatego, że ich obecność sprzyja zbliżeniu sąsiednich centrów metalicznych co często znajduje swoje odzwierciedlenie we właściwościach magnetycznych oraz elektronowych [3].

W naszym zespole od kilku lat prowadzimy badania nad związkami koordynacyjnymi opartymi na zasadach Schiffa otrzymywanych z 4*H*-1,2,4-triazolo-4-aminy z aromatycznymi aldehydami i ketonami [4]. Badamy ich właściwości strukturalne z takimi metalami jak srebro i miedź(I). Poprzez modyfikacje strukturalną ligandów oraz zmianę geometrii anionów poszukujemy różnych ścieżek krystalizacji oraz badamy możliwe motywy strukturalne. Na posterze zaprezentujemy strukturę krystaliczną jednowymiarowego polimeru koordynacyjnego miedzi(I) z ligandem 4ClPhatrzim (Rys. 1), otrzymanego zarówno w wyniku krystalizacji z roztworu, jak i metodą mechanochemiczną. Zdolność liganda 4ClPhatrzim do mostkowania jonów miedzi(I) wspierana obecnością koordynujących anionów halogenowych, prowadzi do ułożenia jonów miedzi w łańcuchu polimerowym w bliskim sąsiedztwie (Cu⋯Cu 2.89 Å).



Rys. 1. 4-(4-chlorofenylo)-*N*-(4*H*-1,2,4-triazol-4-yl)but-3-en-2-imina (4ClPhatrzim).

Literatura

- [1] L. Carlucci, G. Ciani, D. M. Proserpio, *Coord. Chem. Rev.*, **246** (2003) 247.
 [2] D. S. Lawrence, T. Jiang, M. Levett, *M. Chem. Rev.*, **95** (1995) 2229.
 [3] H. E. Toma, K. Araki, A. D. P. Alexiou, S. Nikolaou, S. Dovidauskas, *Coord. Chem. Rev.*, **219–221** (2001) 187.
 [4] (a) E. Ganczar, W. Bury, P. Gawryszewska, V. Kinzhybalo, A. Białońska, *Cryst. Growth Des.*, **25** (2025) 9702. (b) E. Ganczar, A. Białońska, *Acta Cryst. B*, **79** (2023) 392. (c) E. Ganczar, P. Gawryszewska, V. Kinzhybalo, A. Białońska, *Cryst. Growth Des.*, **21** (2021) 7023. (d) A. Białońska, K. Drabent, B. Filipowicz, M. Siczek, *CrystEngComm*, **15** (2013) 9859.

BEYOND CONVENTIONAL CRYSTALLINITY: HYBRID ORGANIC-INORGANIC LEAD HALIDE THAT REMAINS STRUCTURALLY DISORDERED

Andrzej Nowok¹, Anna Gaĝor², Adam Sieradzki¹

¹ *Department of Experimental Physics, Wrocław University of Science and Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław*

² *Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław, Poland*

The interplay between crystal structure and molecular dynamics is a key factor governing the physical properties of hybrid organic–inorganic halides [1,2]. Although these materials are typically considered structurally ordered at low temperatures, many display pronounced dynamic behavior at elevated temperatures, largely driven by the motion of organic cations.

In this work, we investigate a hybrid compound, aminoguanidinium lead iodide (AGAPbI₃), which deviates from this conventional picture [3]. The material undergoes a first-order phase transition at 400/369 K (upon heating/cooling), resulting in a low-temperature monoclinic *C2/c* structure. Using a combination of broadband dielectric spectroscopy, Raman scattering, and X-ray diffraction, we demonstrate that significant molecular dynamics persist even in this low-temperature phase. In particular, the terminal NH₂ groups retain mobility, although their motion progressively slows upon cooling and increasingly interacts with the PbI₆⁴⁻ octahedral framework. The corresponding relaxation times increase dramatically (i.e., from microseconds to thousands of seconds) as the temperature decreases, eventually reaching a regime characteristic of dynamic freezing around 170–180 K. Consequently, we reveal an additional continuous crossover from dynamic to static disorder in AGAPbI₃ that proceeds without any structural transition. The forming static disorder induces local distortions within the low-temperature lattice, which in turn affect the photoluminescence and other optoelectronic properties of the material [3].

Literature

- [1] D. Meggiolaro, F. Ambrosio, E. Mosconi, A. Mahata, F. De Angelis, *Adv. Ener. Mater.*, **10** (2020) 1902748.
- [2] F. Ambrosio, J. Wiktor, F. De Angelis, A. Pasquarello, *Energy Environ. Sci.*, **11** (2018) 101–105.
- [3] A. Nowok, M. Mączka, A. Gaĝor, M. Ptak, J. K. Zaręba, D. Szewczyk, S. Palai, A. Sieradzki, *Chem. Mater.*, **36** (2024) 6588–6597.

INSIGHTS INTO THE TRANSPORT BEHAVIOR AND VIBRATIONAL SPECTRA OF BENZIMIDAZOLIUM SALTS

Hubert Mulczyński^{1,2}, Klaudia Stachowiak², Adam Mizera², Sylwia Zięba²,
Andrzej Gzella³, Andrzej Łapiński²

¹ Faculty of Materials Engineering and Technical Physics,
Poznan University of Technology, Piotrowo 3, 61-138 Poznań, Poland

² Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Sciences,
Mariana Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań, Poland

³ Department of Organic Chemistry, Poznan University of Medical Sciences,
Grunwaldzka 6, 60-780 Poznań, Poland

Proton conductors are an important class of functional materials that play a significant role in modern energy technologies, particularly in the development of advanced energy storage solutions [1]. An important aspect of research on this group of compounds is not only the search for new systems with high thermal stability but also the investigation of their fundamental physicochemical properties, which determine proton-transport efficiency and application potential [2].

The research involved analyzing hydrogen-bond networks to identify potential proton-conduction pathways. The studies focused on two organic salts: benzimidazole salicylate (BenSal) [3] and benzimidazole terephthalate (BenTer). To characterize the compounds, quantum-chemical calculations based on density functional theory (DFT) and spectroscopic methods were employed. The calculations included geometry optimization of the investigated systems, determination of theoretical spectra, and analysis of potential proton-conduction pathways. Experimental studies were carried out using X-ray crystallographic analysis and spectroscopic methods (FT-IR and Raman). The FT-IR spectra for BenSal indicated that the bands at 1593 and 1383 cm^{-1} are attributed to the asymmetric and symmetric stretching of the carboxyl group ($\nu_{\text{asym}}(\text{COO}^-)$), suggesting a proton transfer from the acid to the base.

A network of hydrogen bonds was found to be key to proton transfer in the crystal structures of the salts under study. Proton hopping along hydrogen bonds and molecular rotation were analyzed using PES calculations. Theoretical analysis showed that the hopping mechanism predominates in BenSal, whereas the Grotthuss mechanism predominates in BenTer. To analyze the thermal behavior of ions in BenTer, FT-IR spectroscopy was performed over the temperature range 300-5 K.

Combining experimental studies with DFT calculations provided a more detailed understanding of the relationship between molecular structure and features important for proton transport. Understanding this relationship is crucial for developing new materials intended for use as proton conductors.

Acknowledgments

This research was carried out with the support of the Interdisciplinary Center for Mathematical and Computational Modeling at the University of Warsaw (ICM UW).

Literature

[1] A. J. Thompson, B. S. K. Chong, E. P. Kenny, J. D. Evans, J. A. Powell, M. A. Spackman, J. C. McMurtrie, B. J. Powell, J. K. Clegg, *Nat. Mater.*, **24** (2025) 356–360.

B-22

- [2] S. Zięba, C. Kadlec, A. Mizera, E. Buixaderas, M. Lebeda, P. Ondrejko, J. Hlinka, P. Kužel, *J. Phys. Chem. Lett.*, **17** (2026) 5266.
- [3] M. Amudha, P. P. Kumar, G. Chakkaravarthi, *Acta Cryst. E*, **71** (2015) 794–795.

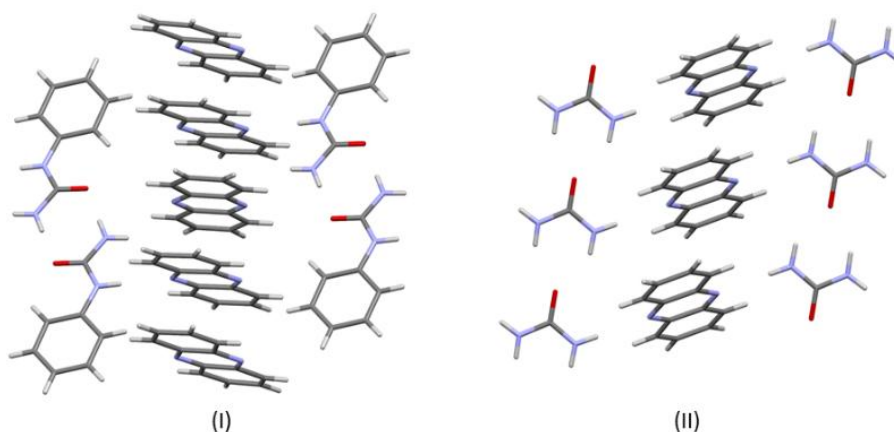
WPLYW GRUPY FENYLOWEJ NA ORGANIZACJĘ SIECI WIĄZAŃ WODOROWYCH W KOKRYSTAŁACH POCHODNYCH MOCZNIKA Z FENAZYNA

Weronika Mruszczuk, Kinga Wzgarda-Raj

*Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Fizycznej ul. Pomorska 163/165,
90-236 Łódź*

Fenazyna jest heterocyklicznym związkiem aromatycznym zawierającym dwa atomy azotu, co umożliwia jej pełnienie roli akceptora wiązań wodorowych i czyni ją dogodnym układem do projektowania struktur supramolekularnych. Mocznik oraz jego pochodne, dzięki obecności grup -NH oraz atomu tlenu w grupie karbonylowej, wykazują wysoką zdolność do tworzenia uporządkowanych sieci wiązań wodorowych [1]. Wprowadzenie grupy fenyłowej w N-fenylomoczniku zmienia właściwości fizykochemiczne cząsteczki, co może wpływać na charakter oddziaływań międzycząsteczkowych oraz organizację struktury krystalicznej [2].

Celem pracy było otrzymanie i porównanie kokryształów fenazyny z mocznikiem oraz N-fenylomocznikiem, ze szczególnym uwzględnieniem wpływu podstawienia fenyłowego na motywy wiązań wodorowych. Kokryształy otrzymano przez powolne odparowanie rozpuszczalnika, a następnie scharakteryzowano je za pomocą rentgenowskiej analizy strukturalnej. Uzyskane wyniki wskazują na różnice w sposobie organizacji oddziaływań międzycząsteczkowych w zależności od zastosowanego donora wiązań wodorowych.



Rys. 1. Ułożenie cząsteczek w kokryształach fenazyny z (I) N-fenylomocznikiem oraz (II) mocznikiem.

Literatura

- [1] C. Stefaniu, P. L. Zaffalon, A. Carmine, Q. Verolet, S. Fernandez, T. A. Wesolowski, G. Brezesinski, A. Zumbuehl, Rigid urea and self-healing thiourea ethanolamine monolayers. *Langmuir*, **31** (2015) 1296–1302.
- [2] J. Chen, R. Xu, F. Liu, H. Zhao, A. Farajtabar, 1-Phenylurea Equilibrium Solubility in Several Mono-Solvents from 283.15 to 323.15 K. *Journal of Chemical and Engineering Data*, **67** (2022) 3210–322.

STRUCTURE OF HYDROGEN-BONDING NETWORKS AND TRANSPORT BEHAVIOR IN HYDROGENATED HEMIMELLITIC ACID SALTS WITH HETEROCYCLIC BASES

**Adam Mizera¹, Sylwia Zięba¹, Paweł Ławniczak¹, Andrzej Gzella²,
Andrzej Łapiński¹**

¹ *Institute of Molecular Physics Polish Academy of Sciences, Mariana Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań, Poland*

² *Department of Organic Chemistry, Poznan University of Medical Sciences, Grunwaldzka 6, 60-780 Poznań, Poland*

Researchers have been searching for new functional materials, paying particular attention to their potential applications in various fields. One such group is solid-state proton conductors derived from heterocyclic bases and carboxylic acids. These materials can be used as electrolytes in fuel cells or for storing hydrogen [1-3]. These salts exhibit good thermal stability and proton conductivity; thus, they are suitable materials for conductive membranes.

The research focuses on the hydrated salts of hemimellitic acid with imidazole (ImiHem·H₂O) and pyrazole (PyrHem·H₂O) [4–6]. Studies were conducted using various methods, including X-ray diffraction, impedance spectroscopy, FT-IR, and DFT calculations. X-ray structural analyses indicate that the salts crystallize in the monoclinic system with space groups P2/c (ImiHem·H₂O) and C2/c (PyrHem·H₂O). The salts studied were found to form a network of charge-transfer hydrogen bonds. The presence of water within these networks was also noted. A helical motif (chain motif) was observed in the N⁺–H···O[–] hydrogen bonds in ImiHem·H₂O. By contrast, a ring motif was observed in PyrHem·H₂O, indicating a fundamental difference in the hydrogen-bond network.

Impedance spectroscopy has shown that for ImiHem·H₂O, the electrical conductivity σ_{DC} is $8 \cdot 10^{-5} \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$, whereas for PyrHem·H₂O, $\sigma_{DC} = 8.2 \cdot 10^{-3} \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$. The calculated activation energies from the conductivity measurements indicate that for ImiHem·H₂O, E_a is 2.67 eV at temperatures up to 373 K. However, for PyrHem·H₂O, E_a ranges from 5.05 to 1.23 eV. DFT calculations and FT-IR spectroscopy revealed that the long-range conductivity of ImiHem·H₂O at room temperature is primarily due to a base subnetwork involving imidazole librations, indicating the presence of the Grotthuss mechanism.

Research indicates that the closed-ring hydrogen-bonding motif of PyrHem·H₂O significantly stiffens the crystal structure, consequently reducing the likelihood of proton transport within the crystal lattice at room temperature. Conversely, near the melting point, conductivity improves. By contrast, the open-chain hydrogen-bonding motif of ImiHem·H₂O suggests that the Grotthuss mechanism is more likely to occur at room temperature than in the hydrated salt of pyrazole with hemimellitic acid.

B-24

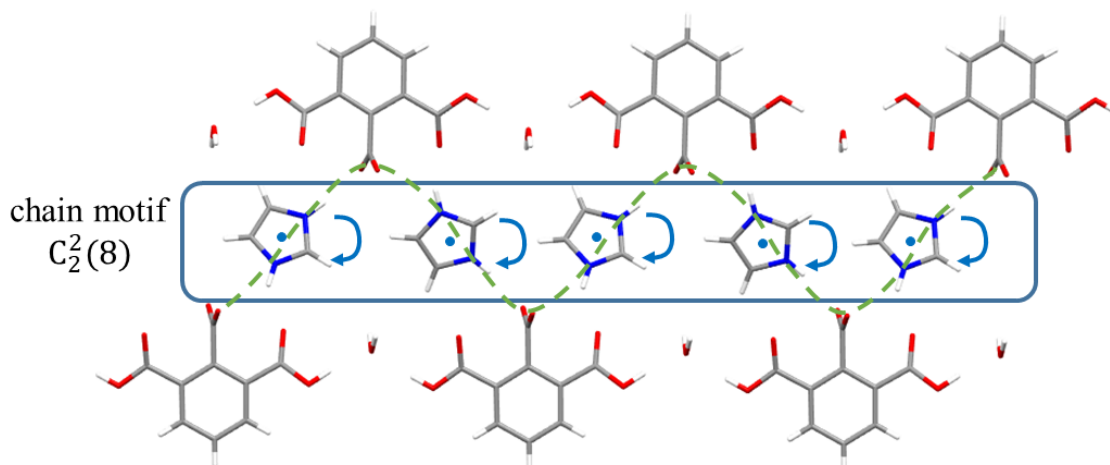


Fig. 1. The proposed Grotthuss mechanism for ImiHem·H₂O, involving imidazole libration.

Literature

- [1] Y. Sunairi, S. Dekura, A. Ueda, T. Ida, M. Mizuno, H. Mori, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **89** (2020) 051008.
- [2] I. Honma, M. Yamada, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **80** (2007) 2110.
- [3] Y. Hori, S. Dekura, Y. Sunairi, T. Ida, M. Mizuno, H. Mori, Y. Shigeta, *J. Phys. Chem. Lett.*, **12** (2021) 5390.
- [4] S. Zięba, A. Mizera, K. H. Markiewicz, A. T. Dubis, P. Ławniczak, A. Gzella, L. Siergiejczyk, A. Łapiński, *J. Phys. Chem. C.*, **127** (2023) 24403.
- [5] S. Zięba, C. Kadlec, S. Priya, Y. Lin, A. Mizera, M. Dressel, P. Kužel, *J. Phys. Chem. Lett.*, **17** (2026) 4041.
- [6] S. Zięba, A. Piotrowska, A. Mizera, P. Ławniczak, K. H. Markiewicz, A. Gzella, A. T. Dubis, A. Łapiński, *Molecules* **26** (2021) 4657.

Acknowledgements

The research was financed as a research project under the “BEKKER NAWA 2024” program (The Polish National Agency for Academic Exchange, BPN/BEK/2024/1/00125/U/00001). This research was carried out with the support of the Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling at the University of Warsaw (ICM UW).

ANALIZA POCHODNYCH HYDRAZYN JAKO NOWYCH ŚRODKÓW PRZECIWBAKTERYJNYCH

**Magdalena Ostrycharz¹,
Andrzej Olczak¹, Katarzyna Gobis², Malwina Krause², Małgorzata Szczesio¹**

¹ *Zespół Rentgenografii Strukturalnej i Krystalochemii,
Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka,
ul. Żeromskiego 114, 90-543 Łódź*

² *Katedra i Zakład Chemii Organicznej, Wydział Farmaceutyczny,
Gdański Uniwersytet Medyczny, Al. Gen. J. Hallera 107, 80-416 Gdańsk*

Gwałtowny wzrost liczby szczepów bakteryjnych opornych na dostępne antybiotyki, w dużej mierze spowodowany ich nadmiernym i niewłaściwym stosowaniem, stanowi obecnie jedno z kluczowych wyzwań dla zdrowia publicznego na świecie [1]. Mimo rosnącej liczby badań nad nowymi lekami przeciwbakteryjnymi, wciąż obserwuje się ograniczoną liczbę związków oferujących nowe mechanizmy działania, w tym przeciwko bakteriom Gram-ujemnym. W związku z tym poszukiwanie nowych struktur molekularnych o potencjalnej aktywności biologicznej stanowi istotny kierunek współczesnych badań [2].

Przeprowadzono krystalizację oraz analizę strukturalną związków o potencjalnym zastosowaniu w badaniach biologicznych. W celu uzyskania monokryształów zastosowano proces krystalizacji metodą powolnego odparowania rozpuszczalnika, użyto dimetyloformamidu oraz metanolu. Otrzymane kryształy poddano analizie metodą monokrystalicznej dyfrakcji rentgenowskiej, co umożliwiło szczegółowe wyznaczenie ich struktury molekularnej.

Wybrane związki krystalizowały w grupach przestrzennych $P\bar{1}$, $Pca2_1$, $P2_1/n$. Przeprowadzona analiza strukturalna potwierdziła obecność w strukturach centrów donorowo-akceptorowych, obejmujących w tym atomy azotu, siarki oraz grupy N–H, które odgrywają istotną rolę w oddziaływaniach z potencjalnymi celami biologicznymi, co wskazuje na zasadność dalszych badań nad aktywnością przeciwbakteryjną analizowanych związków.

Praca wykonana/sfinansowana w ramach projektu/grantu: FU²N – Fundusz Udoskonalania Umiejętności Młodych Naukowców

Literatura

- [1] World Health Organization. (2024). 2023 antibacterial agents in clinical and preclinical development: An overview and analysis. Retrieved May 11, 2026, from <https://www.who.int/publications/i/item/9789240094000>
- [2] World Health Organization. (2024). WHO antibacterial preclinical pipeline review. Retrieved May 11, 2026, from <https://www.who.int/observatories/global-observatory-on-health-research-and-development/monitoring/who-antibacterial-preclinical-pipeline-review>

RENTGENOWSKA I NEUTRONOWA ANALIZA STRUKTURALNA KRYSZTAŁÓW ZWIĄZKU (ADENINATO-N₉)(TRIETYLOFOSFINA)ZŁOTO(I) W WARUNKACH ZMIENNEJ TEMPERATURY

Dominik Duch¹, Anna Makal²

¹ *Kolegium MISMaP, Uniwersytet Warszawski, ul. Stefana Banacha 2C,
02-097 Warszawa*

² *Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, Centrum Nauk Biologiczno Chemicznych,
Żwirki i Wigury 101, 02-089 Warszawa*

Przemiany fazowe materiałów krystalicznych typu monokryształ – monokryształ są interesujące ze względu na możliwość powiązania zmian strukturalnych ze zmianami właściwości fizycznych, takich jak rozszerzalność temperaturowa, przewodnictwo elektryczne czy fotoluminescencja w ciele stałym, a w konsekwencji potencjał do projektowania materiałów przełączalnych [1,2]. Dogodnym modelem do badania wpływu temperatury na strukturę ciała stałego i dynamikę przemian fazowych jest kompleks złota(I) z anionem adeniny i trietylofosfiną (AuA). Wynika to z bogactwa dostępnych konformacji ligandu fosfinowego [3,4] oraz stabilizującego strukturę układu wiązań wodorowych tworzonych przez reszty adeninowe [5].

Istotnym problemem rentgenowskiej analizy strukturalnej jest dokładne ustalenie położeń atomów wodoru, z uwagi na ich niską wartość atomowego czynnika rozpraszania. Szczególne wyzwanie stanowi wyznaczanie położeń atomów H w strukturach związków zawierających atomy metali ciężkich [6].

W bieżącej pracy rozwiązanie problemu podjęto stosując pomiary dyfrakcji neutronowej¹. Ze względu na samą naturę oddziaływań neutronów z materią, uzyskanie odpowiednio dużej ilości badanego materiału zawsze stanowiło jeden z czynników ograniczających prowadzenie eksperymentów dyfrakcji neutronowej. Konieczność otrzymania monokrystalicznych próbek o objętości co najmniej 1 mm³ [7,8], a dawniej nawet o kilka rzędów wielkości większych, znacząco ograniczała liczbę podejmowanych badań z wykorzystaniem neutronowej dyfrakcji monokrystalicznej. W celu uzyskania monokryształów zdolnych do pomiarów dyfrakcji neutronów w ramach projektu dopracowano metodę syntezy i krystalizacji AuA. Wykonano oraz opracowano serię zmiennotemperaturowych pomiarów dyfrakcji rentgenowskiej w zakresie 100–300 K, a także przygotowano modele strukturalne na podstawie danych dyfrakcji neutronowej dla kilku temperatur.

Przeprowadzone eksperymenty pozwoliły na powtarzalne otrzymywanie dużych kryształów rzędu 0,5mm³, które umożliwiły zebranie dobrej jakości danych z dyfrakcji neutronów, oraz analizę zmian zachodzących w strukturze krystalicznej AuA pod wpływem temperatury. W badanym zakresie stwierdzono przemianę fazową o charakterze ciągłym, związaną ze stopniowym pojawianiem się nieporządku strukturalnego. Wyznaczono zależności temperaturowe parametrów sieciowych i kontaktów międzycząsteczkowych.

¹ Dostęp do infrastruktury badań neutronowych na instrumencie KOALA2 w ANSTO został umożliwiony w ramach wniosku programu ACNS oraz przyznanego czasu pomiarowego P21222.

Literatura

- [1] O. Sato, Dynamic Molecular Crystals with Switchable Physical Properties. *Nat. Chem.*, **8** (2016) 644–656. DOI: 10.1038/nchem.2547.
- [2] Y. Zheng, X. Jia, K. Li, J. Xu, X.-F. Bu, Energy Conversion in Single-Crystal-to-Single-Crystal Phase Transition Materials. *Adv. Energy Mater.*, **12** (2022) 2100324. DOI: 10.1002/aenm.202100324
- [3] D. D. Ellis, M. F. Haddow, A. G. Orpen, P. J. Watson, Conformational Analysis of PEt₃ and P(OMe)₃ in Metal Complexes. *Dalton Trans.*, **47** (2009) 10436–10445. DOI: 10.1039/B916065E
- [4] A. Makal, Triethylphosphine as a Molecular Gear—Phase Transitions in Ferrocenyl–Acetylide–Gold(I). *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci., Cryst. Eng. Mater.*, **74** (2018) 427–435. DOI: 10.1107/S2052520618010399
- [5] E. R. T. Tiekink, T. Kurucsev, B. F. Hoskins, X-Ray Structure and UV Spectroscopic Studies of (Adeninato-N9)triethylphosphinegold(I). *J. Crystallogr. Spectrosc. Res.*, **19** (1989) 823–839. DOI: 10.1007/BF01185349
- [6] M. Woińska, M. L. Chodkiewicz, K. Woźniak, Towards Accurate and Precise Positions of Hydrogen Atoms Bonded to Heavy Metal Atoms. *Chem. Commun.*, **57** (2021) 3652–3655. DOI: 10.1039/D0CC07661A
- [7] P. Simoncic et al., Diffraction Instrumentation for Small-Molecule Crystallography: X-ray, Neutron and Electron Diffraction. *Acta Crystallogr., Sect. E*, **79** (2023) 410–422. DOI: 10.1107/S2056989023003050
- [8] K. Fucke, G. J. McIntyre, M.-H. Lemée-Cailleau, X-ray and Neutron Diffraction in the Study of Organic Crystalline Hydrates. *Water*, **2** (2010) 333–350. DOI: 10.3390/w2030333

CRYSTAL ENGINEERING OF AMINOQUINOLINE ISOMER SALTS: STRUCTURE–FLUORESCENCE RELATIONSHIPS IN THE SOLID STATE

Marcin Świątkowski, Tomasz Sierański

*Institute of General and Ecological Chemistry, Lodz University of Technology,
Zeromskiego 114, 90-543 Lodz*

The design of efficient solid-state fluorescent materials is an important topic in modern crystal engineering. Such materials are useful in sensing, optoelectronics, security systems, and light-emitting devices [1,2]. However, fluorescence in the solid state is difficult to predict, because it depends not only on the molecular structure of the fluorophore, but also on the way in which molecules are arranged in the crystal lattice. Intermolecular interactions, such as hydrogen bonds, π – π stacking, anion– π contacts, and van der Waals interactions, can strongly change the emission properties [3,4]. In many cases, aggregation or strong π – π interactions lead to fluorescence quenching [5,6]. Therefore, a detailed understanding of structure–property relationships is necessary for the rational design of new emissive crystalline materials.

Aminoquinoline isomers are an interesting group of organic fluorophores for this type of study. The quinoline core is present in many functional molecules and is known for its useful optical, biological, and coordination properties [7,8]. At the same time, aminoquinoline molecules can form salts with different inorganic acids, which gives a simple and effective way to modify their solid-state structures. In such salts, protonation of the aminoquinoline molecule changes the electron distribution within the organic fluorophore. Moreover, the introduced anions can control the packing arrangement, create new hydrogen-bonding motifs, change distances between aromatic rings, and modify other weak intermolecular interactions [9]. For this reason, inorganic salts of aminoquinoline isomers are a promising platform for studying how small structural changes influence fluorescence in the solid state.

This study focuses on a series of inorganic salts of aminoquinoline isomers. The crystal structures of these compounds were determined by single-crystal X-ray diffraction, and their fluorescence properties were compared with those of the neutral aminoquinoline isomers. The main aim of the work was to determine how protonation, the type of anion, and anion-induced changes in intermolecular interactions affect the emission behavior. The structure–property analysis was based on crystallographic data and solid-state fluorescence measurements, supported by DFT calculations. This combined approach enabled the identification of the most important structural factors responsible for fluorescence enhancement or quenching. The presented results show that salt formation can be used as a practical crystal-engineering strategy for tuning the photophysical properties of aminoquinoline-based materials.

B-27

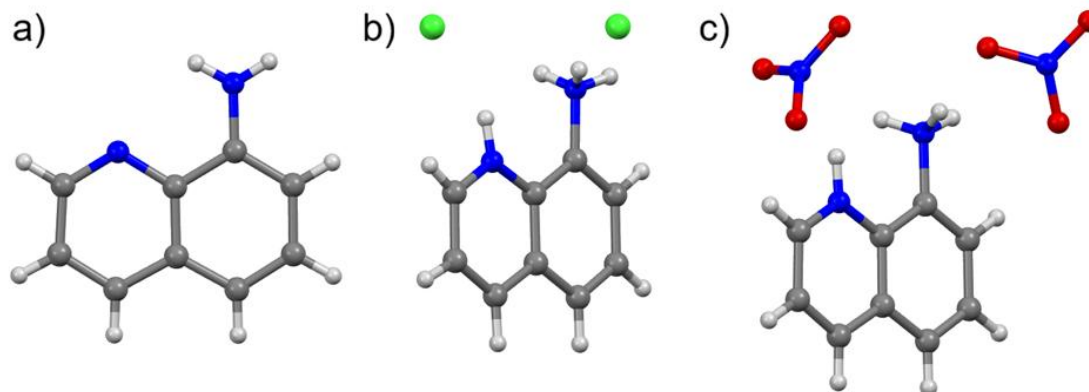


Fig. 1. Molecular structures of 8-aminoquinoline (a) and its diprotonated chloride (b) and nitrate (c) salts.

Literature

- [1] J. Gierschner, J. Shi, D. Roca-Sanjuán, B. Milián-Medina, S. Varghese, S. Y. Park, *Adv. Opt. Mater.*, **9** (2021) 2002251.
- [2] L. Belmonte-Vázquez, Y. A. Amador-Sánchez, L. A. Rodríguez-Cortés, B. Rodríguez-Molina, *Chem. Mater.*, **33** (2021) 7160–7184.
- [3] M. Bogdan, T. Sierański, M. Świątkowski, A. Trzęsowska-Kruszyńska, *CrystEngComm*, **25** (2023) 1993.
- [4] M. Bogdan, T. Sierański, M. Świątkowski, A. Trzęsowska-Kruszyńska, *Cryst. Growth Des.*, **24** (2024) 93–102.
- [5] F. Witte, P. Rietsch, N. Nirmalanathan-Budau, F. Weigert, J. P. Götze, U. Resch-Genger, S. Eigler, B. Paulus, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **23** (2021) 17521–17529.
- [6] W. Z. Yuan, P. Lu, S. Chen, J. W. Y. Lam, Z. Wang, Y. Liu, H. S. Kwok, Y. Ma, B. Z. Tang, *Adv. Mater.*, **22** (2010) 2159–2163.
- [7] A. Ghosh, A. Adhikary, *Coord. Chem. Rev.*, **536** (2025) 216654.
- [8] L. Melo, A. M. S. Silva, H. M. T. Albuquerque, *Eur. J. Med. Chem.*, **296** (2025) 117874.
- [9] P. Sobczak, T. Sierański, M. Świątkowski, A. Trzęsowska-Kruszyńska, *CrystEngComm*, **25** (2023) 6185.

KIEDY FOSFOR PRZEJMUJE KONTROLĘ – STRUKTURALNE KONSEKWENCJE σ -DELOKALIZACJI W UKŁADACH RAHB

Anna Pietrzak¹, Przemysław Nowak^{2,3}, Silvia C. Capelli⁴, Marta Dudek²,
Wojciech M. Wolf¹

¹ Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej, Politechnika Łódzka, Żeromskiego 114,
90-543 Łódź

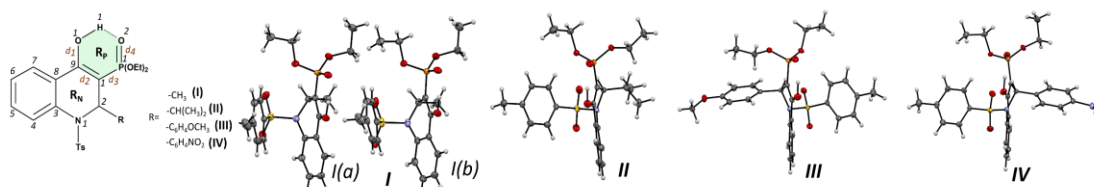
² Centrum badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, Sienkiewicza 112, 90-363
Łódź

³ BioMedChem Szkoła Doktorska UŁ i Instytutów PAN, Matejki 21/23, 90-237 Łódź

⁴ ISIS Neutron and Muon Facility RAL, OX11-0QX Didcot, UK

Wewnątrzcząsteczkowe wiązania wodorowe w układach sprzężonych są zazwyczaj interpretowane w ramach koncepcji rezonansowo wspomaganego wiązania wodorowego (RAHB), zaproponowanej w 1989 roku przez Gilliego, zgodnie z którą delokalizacja elektronów π kooperatywnie wzmacnia oddziaływanie typu O–H \cdots O [1]. W niniejszej pracy wykazujemy jednak, że układy o geometrii charakterystycznej dla RAHB mogą powstawać w wyniku zasadniczo odmiennego mechanizmu elektronowego.

Rentgenowska analiza strukturalna monokryształów badanych fosforylowanych hydrochinolinoli wykazała obecność wewnątrzcząsteczkowych wiązań wodorowych typu O–H \cdots O=P. Badania natury i charakterystyki tych oddziaływań uzupełniono o dyfrakcję neutronową, która pozwala rozstrzygnąć, czy obserwowana geometria odpowiada rzeczywistej lokalizacji protonu, czy też dynamicznie uśrednionemu wiązaniu wodorowemu [2]. W celu określenia elektronowego mechanizmu stabilizacji wiązania przeprowadzono analizę NBO. Z kolei wyniki spektroskopii NMR oraz FTIR w roztworze umożliwiły ocenę siły i stabilności wiązania w warunkach roztworowych.



Rys. 1. Struktury oraz schemat numeracji atomów badanych związków I, II, III, oraz IV. Parametry elipsoid przemieszczeń atomowych (ADP) są ustawione na poziomie prawdopodobieństwa 50%.

Literatura

- [1] G. Gilli, F. Bellucci, V. Ferretti, V. Bertolasi, *J. Am. Chem. Soc.*, **111** (1989) 1023–1028.
[2] A. Pietrzak, W. Wolf, S. Capelli, Unraveling the mysteries of an intramolecular hydrogen bonding defined by the phosphoryl group, *STFC ISIS Neutron and Muon Source* (2024). DOI: 10.5286/ISIS.E.RB2420123

The work has been supported by National Science Centre, Poland (NCN) and 2019/03/X/ST4/01389 within the programme „FU²N – Fundusz Udoskonalania Umiejętności Młodych Naukowców” supporting scientific excellence of Lodz University of Technology, under the contract No. W-3D/FU2N/8/2024.

We gratefully acknowledge the Science and Technology Facilities Council (STFC) for access to neutron beamtime at ISIS (SXD facility). Proposal No. RB2420123.

ANALIZA STRUKTURALNA I SUPRAMOLEKULARNA POCHODNYCH HYDRAZyny METODĄ DYFRAKCJI RENTGENOWSKIEJ MONOKRYSTAŁÓW ORAZ KORELACJA Z AKTYWNOŚCIĄ BIOLOGICZNĄ

Krzysztof Muszyński¹, Małgorzata Szczesio¹, Andrzej Olczak¹, Katarzyna Gobis²

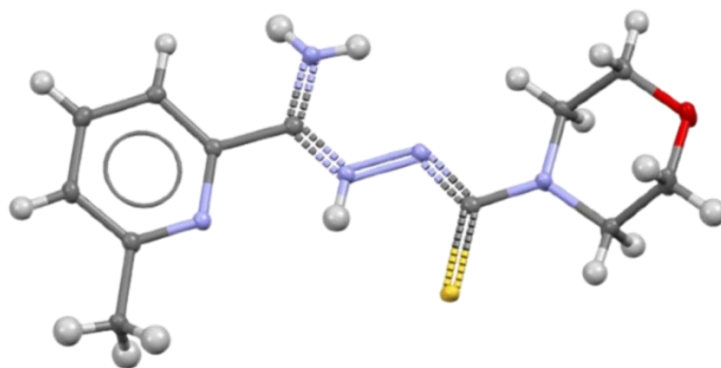
¹ *Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka,
ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź*

² *Katedra i Zakład Chemii Organicznej, Wydział Farmaceutyczny, Gdański Uniwersytet
Medyczny, ul. Hallera 107, 80-416 Gdańsk*

Antybiotykooporność jest jednym ze współczesnych problemów zdrowia publicznego i stanowi poważne zagrożenie dla ludzi. Zjawisko to jest dużym wyzwaniem dla systemów opieki zdrowotnej, a także obciążeniem finansowym dla państw. Współczesna medycyna stoi przed koniecznością poszukiwania nowych związków wykazujących potencjalne działanie przeciwbakteryjne [1]. Obiecującą grupą związków w poszukiwaniu nowych kandydatów na leki są pochodne hydrazyny. Obecność grupy hydrazynowej umożliwia ich łatwą modyfikację strukturalną. Związki te wykazują ponadto szerokie spektrum aktywności biologicznej [2].

W celu oceny potencjalnej aktywności przeciwbakteryjnej hydrazyny oraz określenia jej struktury przeprowadzono szczegółową analizę wybranej pochodnej hydrazyny. Obejmowała ona krystalizację, udokładnienie struktury, dokowanie molekularne oraz analizę farmakokinetyczną.

Metodyka pracy opierała się na wykorzystaniu dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego (XRD). Do pomiarów dyfraktometrycznych monokrystałów wykorzystano dyfraktometr monokrystaliczny Rigaku XtaLAB Synergy.



Rys. 1 Struktura 3D pochodnej hydrazyny.

Literatura

- [1] L. Chen, S. Kumar, H. Wu, A review of current antibiotic resistance and promising antibiotics with novel modes of action to combat antibiotic resistance. *Archives of Microbiology*, **205**(11) (2023) 356. <https://doi.org/10.1007/s00203-023-03699-2>
- [2] T. J. Wiegand, G. Brock, (2024) Hydrazine. In P. Wexler (Ed.), *Encyclopedia of Toxicology (Fourth Edition)* (pp. 381–386). Academic Press. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-824315-2.01191-X>

EFFECT OF PROTONATION AND CRYSTAL PACKING ON THE SOLID-STATE FLUORESCENCE OF HYDRALAZINE HYDRAZONE HYDROCHLORIDES

Igor Mossur, Agata Trzęsowska-Kruszyńska, Marcin Świątkowski, Tomasz Sierański

Analytical and Structural Chemistry Group, Institute of General and Ecological Chemistry, Lodz University of Technology, Żeromskiego 114, 90-543 Lodz, Poland

Organic compounds exhibiting solid-state emission constitute an interesting group of molecular materials due to their potential application in optoelectronics, optical sensors, and security materials [1-3]. Particular attention is paid to systems whose emissive properties can be modulated through structural modifications, intermolecular interactions, and changes in the protonation state. Hydralazine hydrazones are an interesting group of compounds in this context, as they combine the presence of a hydrazone moiety, a conjugated π -electron system, and sites capable of protonation and intermolecular interactions.

The aim of the study was to determine the influence of molecular structure, the nature of substituents and crystal packing on the solid-state fluorescence of a series of hydralazine hydrazone hydrochlorides. For this purpose, compounds containing various aldehyde fragments were synthesized, including both aromatic aldehydes and cinnamaldehyde derivatives with an extended conjugated system. The comparison of the obtained structures enabled an analysis of the relationships between electronic effects, the presence of potential hydrogen-bond donors and acceptors, the degree of conjugation, and the organization of molecules in the solid state.

It was shown that the free hydrazone bases in the investigated series exhibit very weak emission or no emission, whereas the corresponding hydrochlorides display solid-state fluorescence. This observation indicates that protonation may play an important role in inducing emissive properties in this group of compounds. It was also found that the emission maximum and fluorescence intensity depend not only on the molecular structure, but also on the crystal packing and the type of intermolecular interactions present in the crystal lattice.

The obtained results indicate that hydralazine hydrazone hydrochlorides may serve as a useful model for studying the relationships between protonation, molecular structure, crystal packing, and solid-state emission. This approach may support the design of new organic fluorescent materials with properties modulated by structural changes and interactions in the solid state.

Literature

- [1] M. K. Bera, P. Pal, S. Malik, *J. Mater. Chem. C*, **8** (2020) 788.
- [2] N. Akshaya, A. Thomas, G. J. Martis, S. L. Gaonkar, *Discov. Appl. Sci.*, **7** (2025) 110.
- [3] Y. Li, P. Gao, *Chemosensors*, **11** (2023) 489.

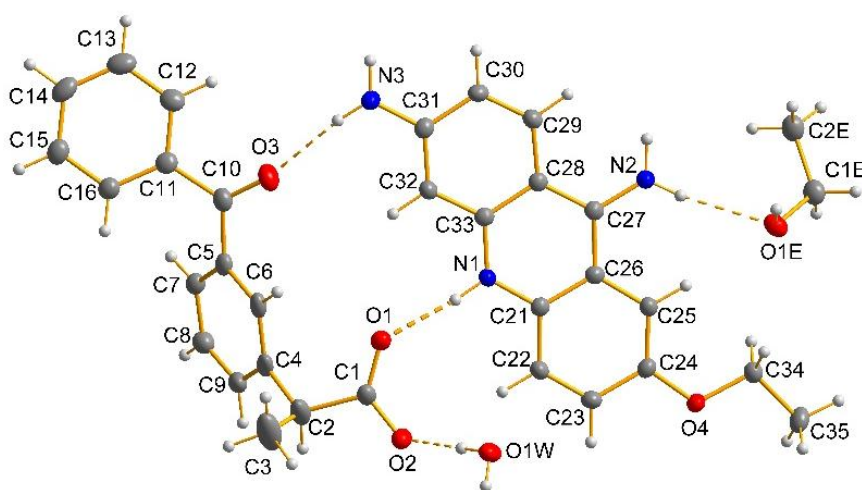
B-31

STRUKTURA SOLI KETOPROFENU Z ETAKRYDYNĄ

Marta S. Krawczyk

Wydział Farmaceutyczny, Katedra i Zakład Podstaw Nauk Chemicznych, Uniwersytet Medyczny im. Piastów Śląskich we Wrocławiu, Borowska 211A, 50-556 Wrocław.

Kontynuując badania nad solami i kokryształami substancji leczniczych otrzymano sole racemicznego ketoprofenu i enancjomeru *S* z etakrydyną. Ketoprofen należy do klasy niesteroidowych leków przeciwzapalnych (NLPZ) [1-3] i jest syntezowany w postaci mieszaniny racemicznej. Etakrydyna, znana w postaci soli mleczanu, wykazuje właściwości antyseptyczne.



Rys. 1. Struktura soli (*R,S*)-ketoprofenu z etakrydyną.

Sól (*R,S*)-ketoprofenu z etakrydyną krystalizuje w grupie przestrzennej $P2_1/c$, a sól enancjomeru *S* w grupie $P1$. Kryształy obydwu soli otrzymano w postaci solwatów. Występują w nich sieci wiązań wodorowych typu $N-H\cdots O$ i $O-H\cdots O$ oraz innych słabych oddziaływań.

Literatura

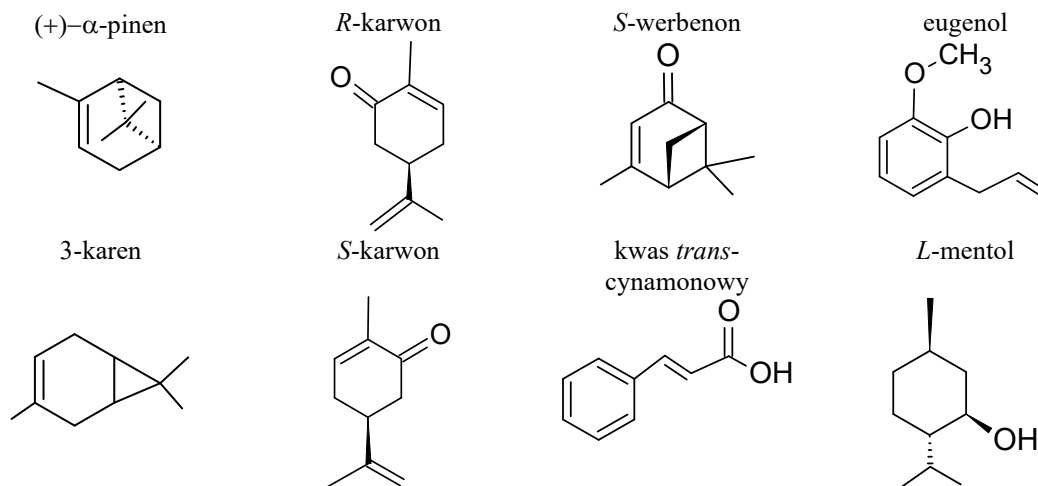
- [1] L. Jolou, J. C. Guyonnet, R. Ducrot, C. Garret, M. Bardone, G. Maignan, J. Pasquet, *Pharmacol.*, **2** (1971) 259.
- [2] P. M. D. Stensrud, O. M.D. Sjaastad, *Headache*, **14**(2) (1974) 96.
- [3] L. Julou, J. C. Guyonnet, R. Ducrot, J. Fournel, J. Pasquet, *Scand. J. Rheumatol.*, **5**(14) (1976) 33.

KOMPLEKSY β -CYKLODEKSTRYNY Z TERPENOIDAMISevastian Piskunov, Anna E. Koziol

Wydział Chemii, Uniwersytet Marii-Curie Skłodowskiej, 20-031 Lublin

Cyklodekstryny, cykliczne oligosacharydy, są grupą związków bardzo szeroko stosowaną do tworzenia układów supramolekularnych gość-gospodarz. Kompleksy molekularne β -cyklodekstryn (β -CD) są wykorzystywane w przemyśle spożywczym, farmaceutycznym czy kosmetycznym do poprawy własności fizyko-chemicznych gości, np. zwiększania stabilności chemicznej, termicznej, rozpuszczalności, biodostępności. Do hydrofobowej wnęki cząsteczek β -CD mogą dokować się mniejsze cząsteczki, posiadające hydrofobowe grupy funkcyjne takie jak fenyłowe, liniowe i cykliczne alkany/alkeny. Do syntezy kompleksów stosuje się różne metody i techniki.

W prezentowanych badaniach użyto metodę wytrąceniową, która polega na dodawaniu do roztworu wodnego β -CD alkoholowych roztworów gościa. W syntezach zastosowano trzy stechiometrie β -CD:gość 1:1, 1:2 i 2:1. Układy reagentów były mieszane przez 10÷18 godzin w temperaturze 45 °C, a następnie chłodzone i dekantowane. Powstałe osady wysuszono i zarejestrowano widma FTIR oraz dyfraktogramy proszkowe. Do syntez wybrano osiem związków terpenoidowych o różnym charakterze chemicznym (Rys. 1); są to węglowodory, ketony i alkohole. Wykonano też syntezę kompleksów β -CD + kwas *trans*-cynamonowy.



Rys. 1. Struktury cząsteczek wybranych terpenoidów.

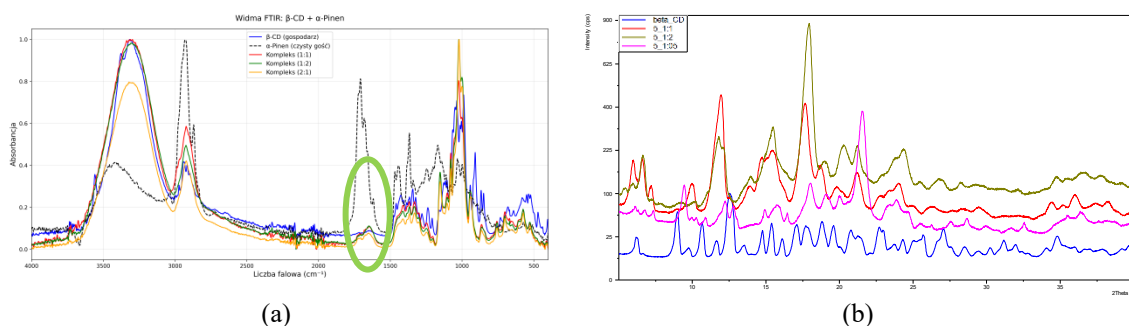
Można znaleźć w literaturze dla kompleksów z tymi gośćmi (z wyjątkiem 3-karenu i *S*-werbenonu) opisy syntez i, dla niektórych, również informacje o strukturach kryształów (*refcod CSD*: TEZZUV, TIBBAJ, TIBBEN, XEYDIQ, NIZGUY, NIZHAF, XERTET). Jednak były one otrzymywane różnymi metodami i w zróżnicowanych warunkach. W prezentowanych badaniach został przyjęty ujednolicony schemat syntez. Przez wykorzystanie widm FTIR sprawdzano, czy w otrzymanej fazie znajduje się cząsteczka gościa. Podstawą identyfikacji była obecność drgań charakterystycznych dla gościa a nieobecnych w β -CD, czyli fragmentów C=C, C=O, C-OH. Natomiast

B-32

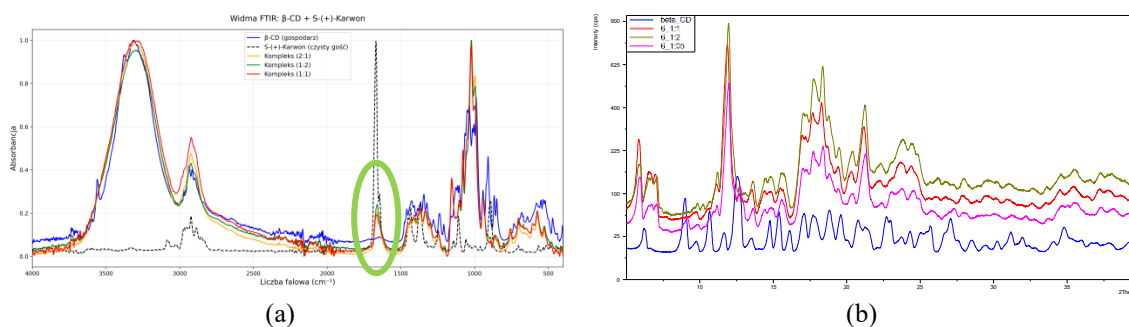
obrazy dyfrakcyjne pozwalają na stwierdzenie, czy dana faza stała ma strukturę identyczną/podobną do wcześniej scharakteryzowanych oraz czy struktura kompleksów zależy od wyjściowej stechiometrii β -CD:gość.

Analiza danych eksperymentalnych wykazała, że każda synteza kompleksu inkluzyjnego dała nowy produkt, w którym znajduje się cząsteczka gościa. Przykładowe widma są załączone na Rys. 2a i 3a.

Porównanie eksperymentalnych rentgenogramów proszkowych z odpowiednimi wygenerowanymi z użyciem danych strukturalnych z analizy monokryształów (TEZZUV, TIBBAJ, TIBBEN, XEYDIQ, XERTET), pozwala na stwierdzenie, że otrzymano nowe fazy. Z kolei zestawienie dyfraktogramów dla próbek o różnej stechiometrii składników użytych w syntezie kompleksu, wykazuje zarówno zmienną strukturę faz krystalicznych – jak w β -CD + α -pinen (Rys. 2b) – jak i stabilną budowę np. kompleksu β -CD + *S*-karwon (Rys. 3b).



Rys. 2. Widmo IR (a) i dyfraktogram (b) dla kompleksów inkluzyjnych β -CD + α -pinen.



Rys. 3. Widmo IR (a) i dyfraktogram (b) dla kompleksów inkluzyjnych β -CD + *S*-karwon.

Mn(III) COMPLEXES WITH IN SITU FORMED OXAZOLINE LIGANDS: CRYSTAL STRUCTURE AND HIRSHFELD SURFACE ANALYSIS

Anna Kozakiewicz-Piekarz¹, Maja Mielcarz¹, Neda Heydari², Rahman Bikas²

¹ *Department of Biomedical and Polymer Chemistry, Faculty of Chemistry, Nicolaus Copernicus University in Torun, 87-100 Toruń, Poland*

² *Department of Chemistry, Faculty of Science, Imam Khomeini International University, 34148-96818, Qazvin, Iran*

Transition metal complexes, particularly those based on manganese, have attracted considerable attention due to their versatile redox properties and applications in catalysis and organic transformations. In parallel, oxazoline-containing compounds represent an important class of heterocycles widely used in coordination chemistry and catalysis. Therefore, the development of new synthetic routes combining these two areas remains of significant interest [1-3].

This work presents the synthesis, structural characterization, and Hirshfeld surface analysis of two new Mn(III) complexes derived from a Schiff base ligand bearing alcohol functionalities. The ligand (H₃L), obtained from 2-hydroxybenzaldehyde and 2-amino-2-(hydroxymethyl)propane-1,3-diol, was confirmed by spectroscopic methods and single-crystal X-ray diffraction [4].

Reaction of the ligand with Mn(II) salts in methanol led to the formation of two complexes: [Mn(H₂L')₂(CH₃OH)Cl] (**1**) and [Mn(H₂L')₂(CH₃OH)_{0.81}(H₂O)_{0.19}Br] (**2**). X-ray analysis revealed that both compounds exhibit similar distorted octahedral geometries around the Mn(III) center, consistent with the Jahn–Teller effect. The molecular structure of complex **1** is shown in Figure 1a, illustrating the coordination environment of the metal center. The main structural difference between the complexes arises from the nature of the coordinated halide ligand, as confirmed by the structure of complex **2** (Figure 1b).

Hirshfeld surface analysis was used to investigate non-covalent interactions and the contribution of weak contacts to the crystal packing of complexes **1** and **2** using d_{norm} . In the d_{norm} surface, there are three color regions (blue, white, and red) according to the electron density in the crystal structure. The red region with high electron density indicates close proximity; the white region shows medium proximity; and the blue region indicates little proximity of the outer atoms in the crystal structure. According to the d_{norm} surface (Figure 2), the red areas are assigned to the hydrogen bond interactions, such as O–H···O, C–H···O and O–H···Cl interactions in the structure of complex **1** and O–H···O, C–H···O, O–H···Br and H···H interactions in the structure of complex **2**.

B-33

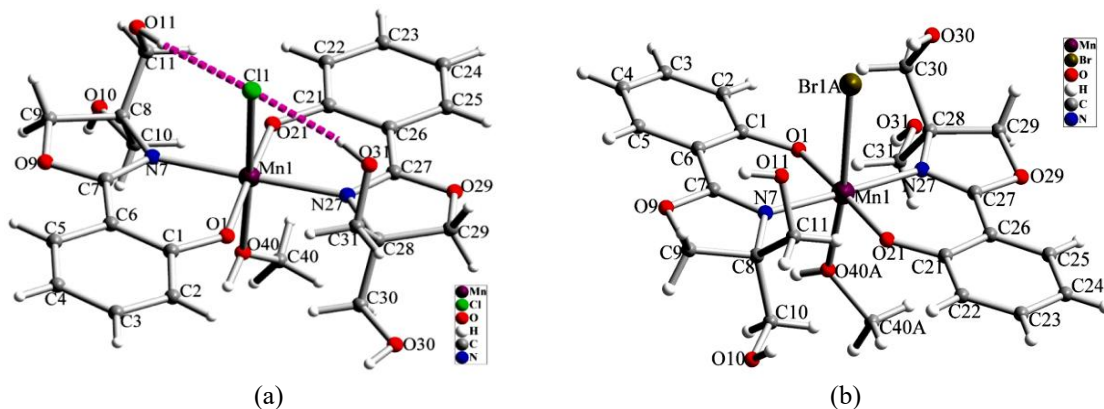


Fig. 1. (a) Molecular structure of $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{L}')_2(\text{CH}_3\text{OH})\text{Cl}]$ (1); pink dashed lines show intramolecular $\text{O}-\text{H}\cdots\text{Cl}$ hydrogen bond interactions. (b) Molecular structure of the major component in the crystal of complex 2; the atoms in the minor components of the disorder are not shown for clarity.

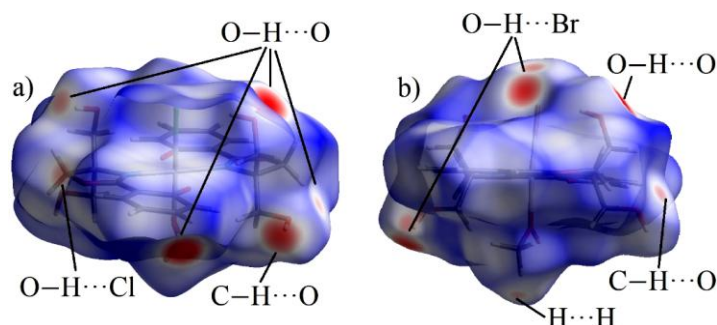


Fig. 2. Hirshfeld surface analysis mapped by d_{norm} for (a) complex 1 and (b) complex 2.

A key finding of this study is the in situ transformation of the initial Schiff base ligand into a new ligand containing an oxazoline ring. This process occurs during complex formation via intramolecular cyclization followed by oxidation. In contrast to conventional methods requiring strong oxidants and multi-step procedures, the transformation proceeds under mild conditions, promoted by the manganese ion in the presence of molecular oxygen.

These findings highlight the dual role of Mn(III) complexes as both catalysts and promoters of ligand transformation. Moreover, the ability to generate oxazoline rings in situ under mild conditions offers a promising, environmentally friendly approach to the synthesis of heterocyclic compounds.

Literature

- [1] P. Dadmehr, R. Bikas, T. Lis, *Dalton Trans.*, **53** (2024) 15246.
- [2] N. Heydari, R. Bikas, M. Siczek, T. Lis, *Dalton Trans.*, **52** (2023) 421.
- [3] F. Soltani, R. Bikas, N. Heydari, A. Kozakiewicz-Piekarz, *New J. Chem.*, **47** (2023) 6102.
- [4] A. Mohammadi, R. Bikas, N. Noshiranzadeh, A. Kozakiewicz-Piekarz, *Inorg. Chem. Commun.*, **188** (2026) 116511.

RARE EARTH COMPLEXES FOR RECYCLING OF POLYCARBONATE WASTE

Adrian Kowaliński¹, Rafał Petrus¹, Tadeusz Lis²

¹ Faculty of Chemistry, Wrocław University of Science and Technology, Smoluchowskiego 23, 50-370 Wrocław

² Faculty of Chemistry, University of Wrocław, F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

Rare earth element coordination compounds have become essential catalysts in organic chemistry, primarily acting as water-tolerant Lewis acids with tunable acidity and flexible coordination numbers. Their strong electron-accepting ability allows for efficient substrate activation across a wide range of transformations, from Diels-Alder and aldol reactions to homogeneous C–H functionalization [1], polymerization [2] or polymer recycling [3]. A key advantage of RE catalysts is their ability to simultaneously coordinate both the substrate and nucleophile, enabling efficient cleavage of stable bonds under mild conditions. However, while simple RE compounds are widely studied, homogeneous multimetallic and heterometallic systems remain largely underexplored. The reactivity of such heterometallic complexes often outperforms their homometallic counterparts.

In our studies we developed an approach for the synthesis of homometallic and heterometallic rare earth complexes via the reaction of zinc aryloxyde precursors $[Zn_4(L)_8]$ or $[Zn_4(\mu_3\text{-OMe})_2(L)_6]$ with $RECl_3$ as summarized in Figure 1.

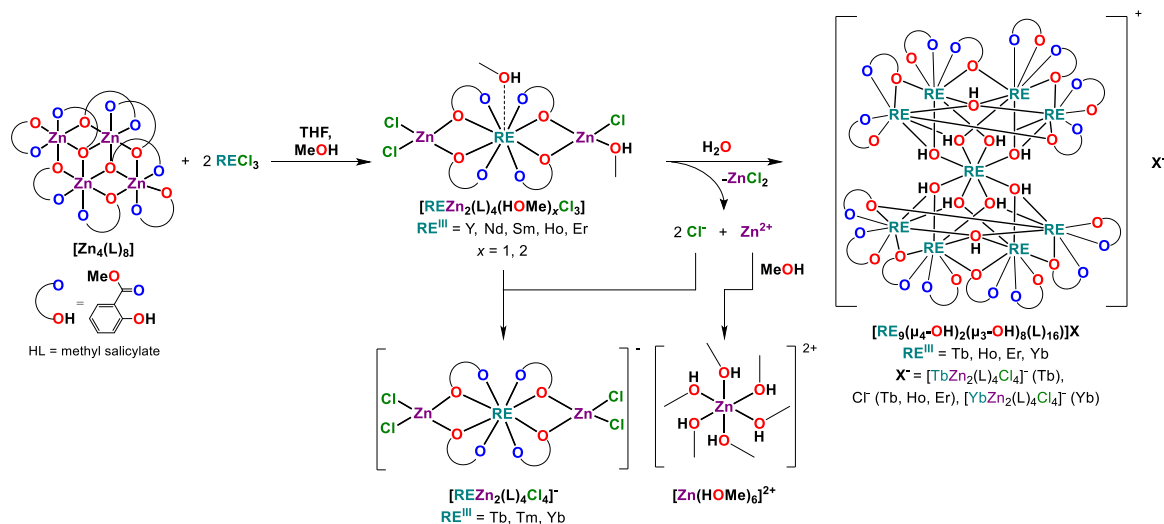


Fig. 1. Synthesis of $[REZn_2(L)_4Cl_3X_x]$, and $[RE_9(\mu_4\text{-OH})_2(\mu_3\text{-OH})_8(L)_{16}]X$ type complexes.

Compounds $[NdZn_2(L)_4Cl_3(HOMe)_2]$ and $[SmZn_2(L)_4Cl_3(HOMe)_2]$ were isolated as single crystals containing additional coordinated MeOH molecules, which caused a significant structural change in the Zn_2O_4RE core (Figure 2). The process of forming such complexes likely involve the disintegration of heterometallic compounds $[REZn_2(L)_4Cl_3X_x]$ via $ZnCl_2$ elimination, followed by chloride migration and the formation of $[REZn_2(L)_4Cl_4]^-$, $[Zn(ROH)_6]^{2+}$ and $[RE_9(\mu_4\text{-OH})_2(\mu_3\text{-OH})_8(L)_{16}]^+$ ions, the

B-34

last of which can be found as either as which were identified as ionic compounds $[\text{RE}_9(\mu_4\text{-OH})_2(\mu_3\text{-OH})_8(\text{L})_{16}][\text{REZn}_2(\text{L})_4\text{Cl}_4]$ (for Tb, Yb) or $[\text{RE}_9(\mu_4\text{-OH})_2(\mu_3\text{-OH})_8(\text{L})_{16}]\text{Cl}$ (for Ho, Er) [4]. Those complexes adopt a sandglass-shaped motif in which nine RE^{III} ions are stabilized by two $\mu_4\text{-OH}$ and eight $\mu_3\text{-OH}$ bridges, along with sixteen methyl salicylate ligands. These cations consist of two square pyramidal units sharing a common apex at the RE1 center and rotated relative to each other by approximately 45° .

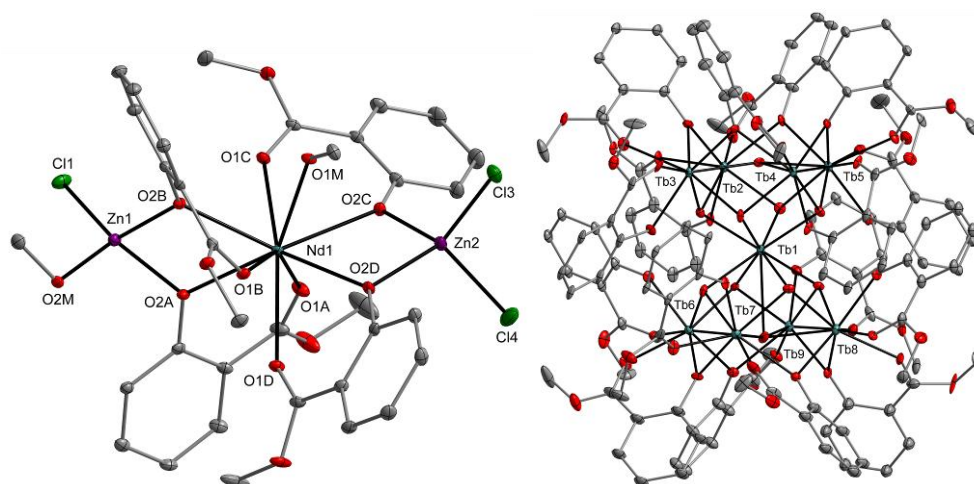


Fig. 2. Molecular structures of $[\text{NdZn}_2(\text{L})_4\text{Cl}_3(\text{HOME})_2]$ and $[\text{Tb}_9(\mu_4\text{-OH})_2(\mu_3\text{-OH})_8(\text{L})_{16}]\text{Cl}$ complexes.

These homometallic and heterometallic rare earth aryloxides served as catalysts in the alcoholysis of post-consumer polycarbonate with *n*-butanol. The catalysts successfully drove the progressive depolymerization of PC via successive carbonate bond cleavage, ultimately yielding bisphenol A (**I**, BPA), di-*n*-butyl carbonate (**II**, DBC) and intermediate species **III** and **IV**, as pictured in Figure 3.

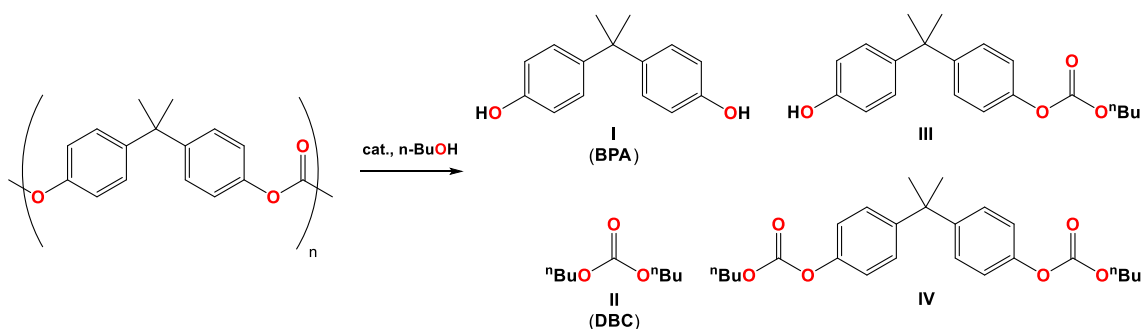


Fig. 3. Alcoholysis of polycarbonate using *n*-BuOH.

Literature

- [1] G. A. Molander, *Chem. Rev.*, **92** (1992) 29.
- [2] A. Kowaliński, R. Petrus, K. Chomiak, T. Lis, *Appl. Organomet. Chem.*, **39** (2025) e70017.
- [3] Y. Kinbara, H. Ishitani, S. Kobayashi, *Green Chem.*, **27** (2025) 7544.
- [4] R. Petrus, A. Kowaliński, T. Lis, M. Siczek, P. Sobota, *Inorg. Chem.*, **64** (2025) 16020.

AK thanks the National Science Centre Poland (grant PRELUDIUM no. 2024/53/N/ST4/01322) for financial support.

B-35

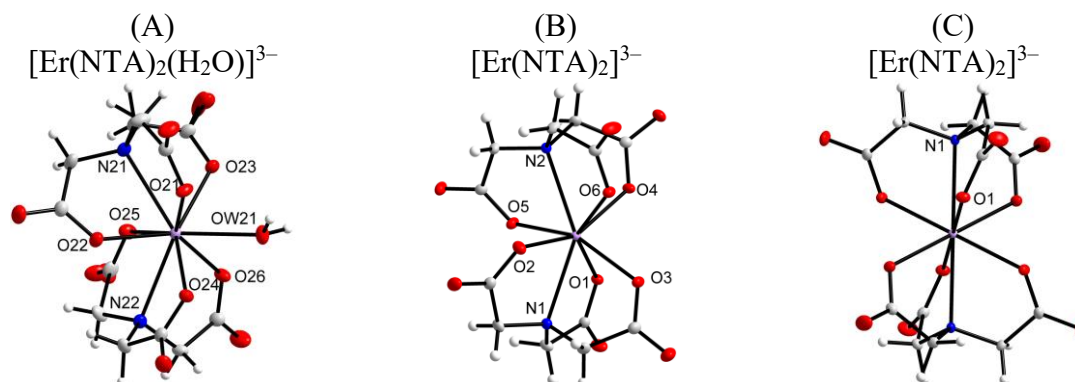
RÓWNOWAGA HYDRATACYJNA W ROZTWORACH Er(III) – NTA – H₂O

Paulina Kielian, Marcin Ziobro, Rafał Janicki

Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-300 Wrocław

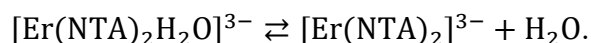
Równowagi hydratacyjne pełnią kluczową rolę w obrazowaniu medycznym metodą magnetycznego rezonansu jądowego (MRI). Metoda ta umożliwia uzyskiwanie obrazów narządów wewnętrznych w oparciu o mechanizm relaksacji protonów cząsteczek wody po uprzednim przyłożeniu zewnętrznego pola magnetycznego. Powszechnie stosowane środki kontrastowe, które w znacznym stopniu poprawiają jakość uzyskanych obrazów, to często związki kompleksowe jonów gadolinu(III) z ligandami poliaminopolikarboksyłowymi [1].

W niniejszej pracy zbadano równowagi hydratacyjne w roztworach związków erbu(III) z ligandem nitrylotrioctanowym. Jon Er(III) charakteryzuje się bogatym widmem elektronowym ze względu na obecność przejść f-f w zakresie 1200 – 200 nm. Co więcej poprzez dobór odpowiedniego kationu koniecznego do neutralizacji ładunku ujemnego anionu kompleksowego [Er(NTA)₂]³⁻ można otrzymać związki o różnych liczbach koordynacyjnych – [Er(NTA)₂]³⁻ (L.K. 8) oraz [Er(NTA)₂(H₂O)]³⁻ (L.K. 9). Otrzymano następujące związki i określono ich struktury krystaliczne: K₃[Er(NTA)₂(H₂O)]·5H₂O (układ jednoskośny, grupa przestrzenna Cc, a = 15,266(2), b = 12,836(2), c = 26,069(3) Å, β = 95,98(10)°, [C(NH₂)₃]₃[Er(NTA)₂]₂·2H₂O (układ trójskośny, grupa przestrzenna P $\bar{1}$, a = 9,614(10), b = 9,800(10), c = 15,176(2) Å, α = 104,83(10), β = 90,75(10), γ = 90,25(10)°, [NH₄]₃[Er(NTA)₂] (układ trygonalny, grupa przestrzenna R $\bar{3}$, a = 7,906(10), b = 7,906(10), c = 54,072(9) Å, α = 90, β = 90, γ = 120°). Aniony kompleksowe przedstawia poniższy rysunek.



Rys. 1. Aniony kompleksowe w zbadanych związkach (A) K₃[Er(NTA)₂(H₂O)]·5H₂O; (B) [C(NH₂)₃]₃[Er(NTA)₂]₂·2H₂O; (C) [NH₄]₃[Er(NTA)₂].

Przeprowadzono pomiary spektroskopowe monokryształów i roztworów oraz wyznaczono parametry termodynamiczne ΔS, ΔH i ΔG reakcji:



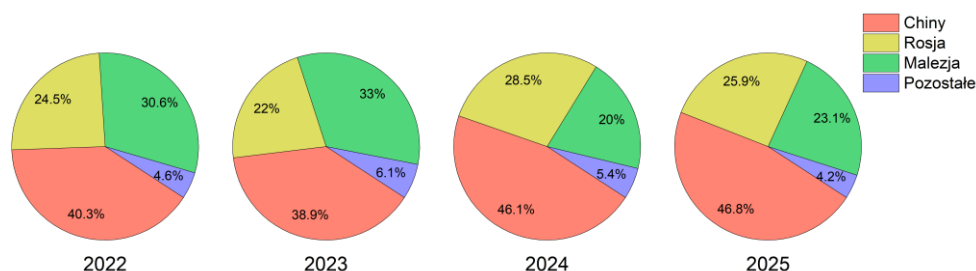
Literatura

- [1] Andre S. Merbach, Lothar Helm, Éva Tóth, *The Chemistry of Contrast Agents in Medical Magnetic Resonance Imaging*, Wiley 2013.

WPYŁW PROMIENIA Ln(III) NA STRUKTURĘ ZWIĄZKÓW TYPU Ln(III)-CDTA-WĘGLAN

Marcin Ziobro, Rafał Janicki

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot Curie 14, 50-383 Wrocław



Rys. 1. Główni importerzy Metali Ziem Rzadkich w latach 2022-2025 [1].

W imporcie pierwiastków ziem rzadkich (REE – ang. *Rare Earth Elements*) do Unii Europejskiej dominują trzy kraje, Chiny Rosja oraz Malezja, których łączy udział w latach 2022-2025 wyniósł około 95%. W celu ograniczenia zależności UE od importu tych surowców konieczne jest opracowanie metod rozdziału, które będą jednocześnie efektywne ekonomicznie, i co równie istotne, będą charakteryzować się minimalnym wpływem na środowisko naturalne. Wśród obecnie stosowanych technik rozdział REE dominują ekstrakcja rozpuszczalnikowa oraz chromatografia. Każda z tych metod obejmuje liczne warianty technologiczne, jednak ich wspólną cechą jest wysokie zużycie rozpuszczalników organicznych [2]. Podejmowano również próby opracowania metod opartych na krystalizacji. Badania te prowadzono głównie pod kątem doboru odpowiedniego rozpuszczalnika [3,4], nie wchodząc w problematykę subtelnych różnic struktur związków w ciele stałym i w roztworze. Ze względu na znaczne podobieństwo właściwości chemicznych lantanowców, zaproponowanie związków, które wykazywałyby istotne różnice w rozpuszczalności, jest zadaniem trudnym. Jak wynika z naszych dotychczasowych badań obiecującą grupą są trójskładnikowe związki kompleksowe lantanowców z ligandami N- i O-donorowymi.

Głównym celem przeprowadzonych badań było otrzymanie związków trójskładnikowych typu Ln(III)-CDTA-węglan i wyznaczenie ich struktury krystalicznej. Zidentyfikowano dwa typy związków kompleksowych: $[\text{Ln}(\text{CDTA})(\text{CO}_3)]^{3-}$ (Ln = La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu) oraz $[\text{Ln}(\text{CDTA})(\text{CO}_3)_2]^{5-}$ (Ln = Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb). Otrzymane związki wykazują zróżnicowaną rozpuszczalność, co wskazuje na ich potencjalne zastosowanie w opracowaniu krystalizacyjnej metody rozdziału jonów Ln(III) z roztworów wodnych.

Literatura

- [1] Eurostat, EU trade since 1988 by HS2-4-6 and CN8 (ds-045409), <https://ec.europa.eu/eurostat/databrowser/bookmark/1398cc1e-0bbb-4ded-9160-81af8bbb5d03?lang=en> (dostęp: 04.05.2026).
- [2] M. Traore et al., *Journal of Rare Earths*, **41** (2023) 182.
- [3] Z. Bai et al., *Inorg. Chem.*, **61** (2022) 19193.
- [4] C. Stetson et al., *Nat. Commun.*, **13** (2022) 3789.

TOWARDS DISCOVERING THE CRYSTAL STRUCTURE OF ANTIVIRAL VIDARABINE MONOPHOSPHATE AND ANTICANCER CYTARABINE MONOPHOSPHATE

Oskar Kaszubowski, Katarzyna Ślepokura

Faculty of Chemistry, University of Wrocław, 14 F. Joliot-Curie, 50-383 Wrocław, Poland

Vidarabine monophosphate (ara-AMP) and cytarabine monophosphate (ara-CMP) are synthetic analogues of the natural nucleotides adenosine monophosphate (AMP) and cytidine monophosphate (CMP). In these analogues, the D-ribose has been replaced with D-arabinose (Fig. 1). Ara-AMP is primarily effective against herpes viruses [1]. However, it is used less frequently nowadays due to its poor water solubility and numerous side effects [2]. In contrast, ara-CMP remains widely used in oncology, primarily to treat leukemia [3,4].

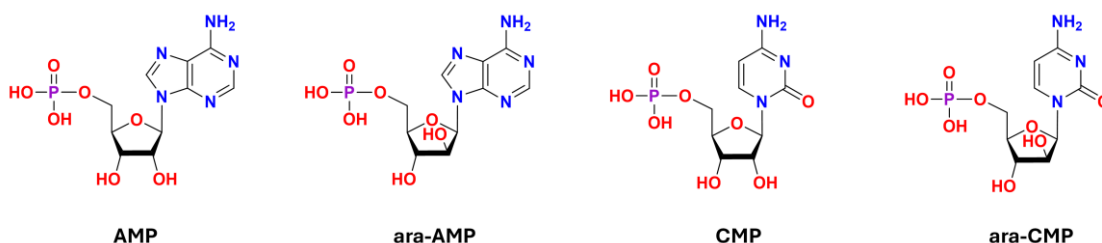


Fig. 1. Chemical structures of AMP and CMP nucleotides and their analogues, ara-AMP and ara-CMP.

Despite their longstanding use in medicine, the solid-state structures of these systems remain poorly understood. In the case of ara-CMP, only one crystal form is known: the trihydrate. Its structure was deposited in the Cambridge Structural Database 46 years ago [5]. Surprisingly, no crystal structure of ara-AMP has been described in the literature.

During crystallization from water, a 3.6-hydrate of ara-AMP was obtained, which was then converted to a monohydrate through thermal dehydration. Additionally, two sodium salts with different water content and crystal architecture were identified. The known trihydrate and its isomorphous water-methanol solvate, as well as a hydrated ammonium salt were obtained in the case of ara-CMP. All forms were characterized in terms of crystal architecture, intermolecular interactions and conformations of the ara-AMP and ara-CMP units (Fig. 2).

The presented crystals constitute some of the first structural reports on these systems and allow for the identification of preferred structural motifs of nucleotide analogues in the solid state. Of particular interest are the sodium salts of ara-AMP, which exhibit significantly enhanced solubility in water compared to crystals of this compound in its acid form. This finding may offer a solution for improving the bioavailability of this drug.

B-37

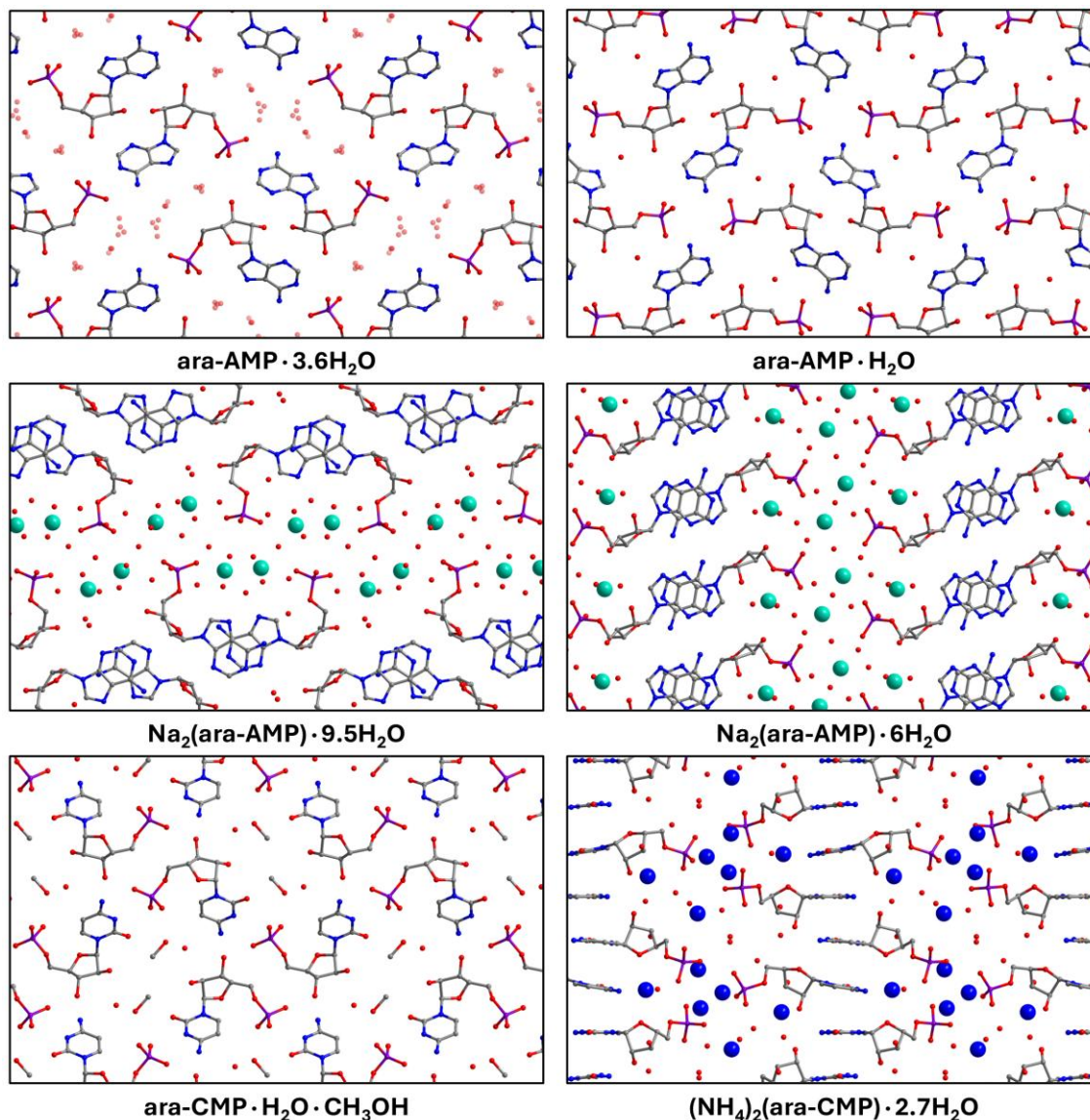


Fig. 2. Architecture of the obtained crystals. The sodium and ammonium ions are marked as big turquoise and blue spheres, respectively. Disordered water molecules are marked transparently. Hydrogen atoms have been omitted for clarity.

Literature

- [1] W. Shen, J.-S. Kim, P. E. Kish, J. Zhang, S. Mitchell, B. G. Gentry, J. M. Breitenbach, J. C. Drach, J. Hilfinger, *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **19** (2009) 792–796.
- [2] E. De Clercq, G. Li, *Clin. Microbiol. Rev.*, **29** (2016) 695–747.
- [3] A. A. Zenchenko, M. S. Drenichev, I. A. Il'icheva, S. N. Mikhailov, *Mol. Biol.*, **55** (2021) 786–812.
- [4] L. Hruby, V. Das, M. Hajduch, P. Dzubak, *Biochem. Pharmacol.*, **215** (2023) 115741.
- [5] J. S. Sherfinski, R. E. Marsh, A. K. Chwang, M. Sundaralingam, *Acta Cryst B*, **35** (1979) 2141–2144.

STRUKTURA MOLEKULARNA I KRYSZTALICZNA NOWYCH 4-PODSTAWIONYCH POCHODNYCH 1-BENZENOSULFONYLO- (TIO)SEMİKARBAZYDU O POTENCJALNEJ AKTYWNOŚCI BIOLOGICZNEJ

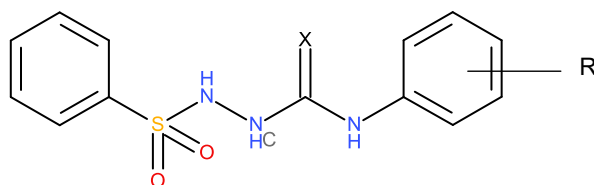
Zbigniew Karczmarzyk¹, Katarzyna Dul², Waldemar Wysocki¹, Monika Pitucha²

¹ Instytut Nauk Chemicznych, Uniwersytet w Siedlcach, ul. 3 Maja 54, 08-110 Siedlce

² Samodzielna Pracownia Radiofarmacji, Uniwersytet Medyczny w Lublinie,
ul. Chodzki 4a, 20-093 Lublin

Pochodne semikarbazylu i tiosemikarbazylu stanowią istotną grupę azotowych związków organicznych o szerokim spektrum aktywności biologicznej, obejmującym działanie przeciwnowotworowe, przeciwwirusowe, przeciwgruźlicze oraz przeciwdrgawkowe [1,2]. Z kolei związki sulfonowe łatwo ulegają różnorodnym modyfikacjom strukturalnym, co znacząco zwiększa zakres ich zastosowań w wielu dziedzinach chemii; w szczególności w chemii medycznej oraz w projektowaniu nowych substancji o pożądanej aktywności biologicznej [3].

Jako kontynuację naszych badań strukturalnych nad pochodnymi semi- i tiosemikarbazylu prezentujemy strukturę krystaliczną i molekularną czterech nowych 4-podstawionych pochodnych 1-benzenosulfonylo(tio)semikarbazylu (Schemat 1; X = S, R = 3-Cl, 3-Br; X = O, R = 2-Br, 2,4-Cl). Związki te otrzymano w wyniku reakcji hydrazylu kwasu benzenosulfonowego z odpowiednimi izotiocyanianami lub izocyjanianami, co pozwoliło na uzyskanie serii analogów różniących się właściwościami elektronowymi podstawników.



Schemat 1

Badania metodami rentgenowskiej analizy strukturalnej monokryształów miały na celu potwierdzenie zakładanego przebiegu syntezy oraz struktury molekularnej badanych związków, a także analizę wpływu modyfikacji strukturalnych semikarbazylów i tiosemikarbazylów, w szczególności obecności ugrupowania sulfonowego, na ich właściwości fizykochemiczne oraz potencjalną aktywność biologiczną.

Literatura

- [1] J. He, X. Wang, X. Zhao, Y. Liang, H. He, L. Fu, *Eur. J. Med. Chem.*, **54** (2012) 925.
- [2] L. Walczak-Nowicka, A. Biernasiuk, W. Ziemichód, Z. Karczmarzyk, M. Kwaśnik, P. Kozyra, W. Wysocki, A. Stenzel-Bembenek, D. Kowalczyk, M. Herbet, M. Pitucha, *Pharmaceuticals*, **16** (2023) 1706.
- [3] S. J. Kokre, R. S. Kavalapure, S. S. Huddi, S. Gharge, S. G. Alegaon, S. D. Rande, M. M. Maste, L. Shing Wong, R. Ramu, D. Venu, *Results Chem.*, **18** (2025) 102858.

IZOKOFEINA NIE JEST JUŻ MONOMORFICZNA

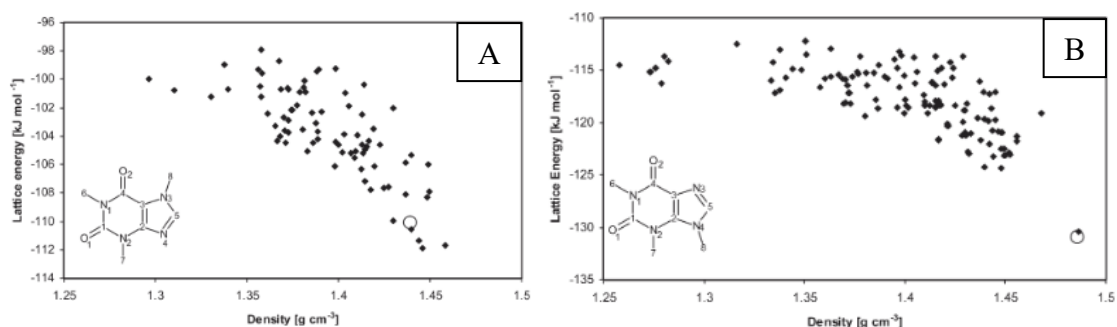
Julia Kamińska^{1,2}, Dorota Krasowska¹, Przemysław Nowak^{1,2}, Marta Dudek¹

¹ Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk, ul. Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź

² Szkoła Doktorska BioMedChem UŁ i Instytutów PAN w Łodzi, ul. Matejki 21/23, 90-237 Łódź

Metodą obliczeniową do przewidywania form polimorficznych związków organicznych jest CSP (ang. *Crystal Structure Prediction*, dosł. przewidywanie struktur krystalicznych), wykorzystujące odpowiednie algorytmy do stworzenia tzw. krajobrazu energii krystalicznej, na którym oś x odpowiada na ogół gęstości, oś y energii kryształu, a wszystkie pojedyncze punkty to potencjalne polimorfy. Jest to metoda teoretyczna, dlatego może ona co najwyżej zasugerować prawdopodobieństwo wystąpienia innych niż dotąd obserwowane form krystalicznych, jednak powszechnie wykorzystuje się ją do odpowiedzi na pytanie: czy warto jest inwestować czas i finanse do poszukiwania nowych form danego związku?

W 2011 roku, Matthew Habgood opublikował artykuł, w którym przedstawione zostały dwa krajobrazy energetyczne CSP dla kofeiny [Rys. 1A] oraz izokofeiny [Rys. 1B].



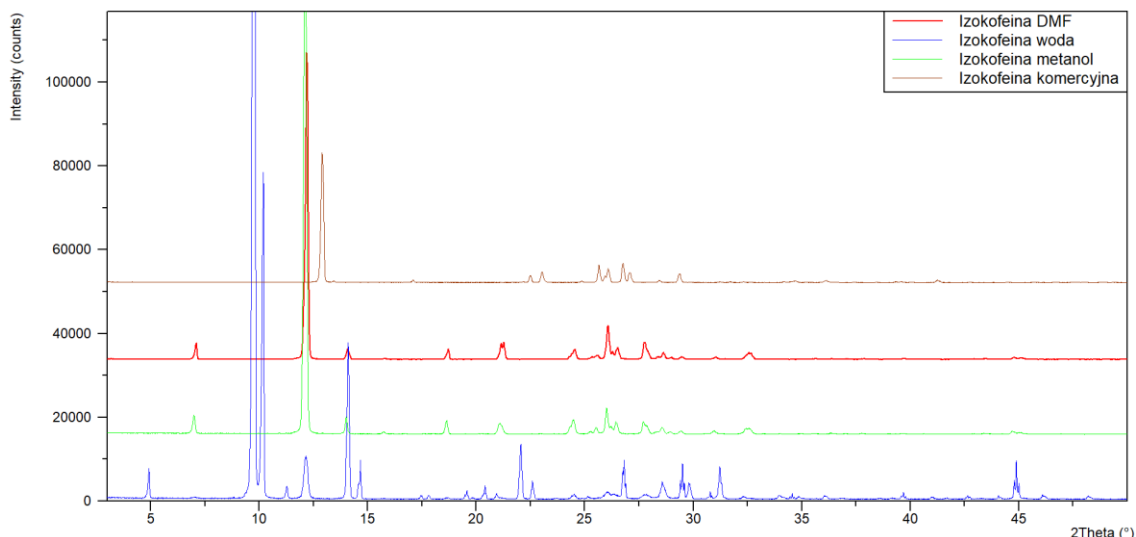
Rys. 1. Krajobraz energetyczny dla kofeiny (A) oraz izokofeiny (B). Każdy punkt odpowiada potencjalnemu kryształowi o danej energii sieci krystalicznej. Kółkiem oznaczono znane eksperymentalnie formę II kofeiny (A) oraz jedyną znaną strukturę izokofeiny (B) [1].

Jak można zaobserwować, potencjalne struktury krystaliczne kofeiny, dla której znanych jest kilka form polimorficznych, zlokalizowane są stosunkowo blisko eksperymentalnie obserwowanej formy II (różnica energii pomiędzy nimi jest niewielka), podczas gdy na drugim krajobrazie obserwuje się znaczną przerwę energetyczną pomiędzy eksperymentalną strukturą krystaliczną izokofeiny a jej potencjalnymi polimorfami. Na tej podstawie stwierdzono, iż izokofeina jest najprawdopodobniej związkiem monomorficznym [2]. Przeprowadzone przez nas dokładniejsze obliczenia podważyły ten wniosek, co potwierdziły eksperymenty.

Izokofeinę otrzymaliśmy w wyniku reakcji alkilowania teofiliny za pomocą siarczanu dimetylu po uprzednim zabezpieczeniu uprzywilejowanej pozycji 4 grupą cyanoetylową. Dla tak otrzymanego produktu przeprowadziliśmy krystalizacje z szeregu rozpuszczalników, m.in: metanolu (w 68°C), DMF (w 140°C), acetonitrylu (w 90°C) oraz wody (w 100°C). W wyniku przeprowadzonych eksperymentów

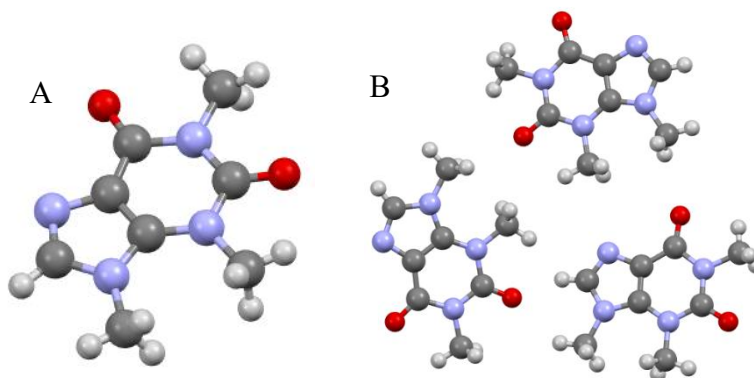
B-39

otrzymaliśmy dwie formy krystaliczne różniące się od formy komercyjnej, co przedstawia poniższy dyfraktogram [Rys. 2]. TGA wykazało, że jedna z nich, krystalizowana z metanolu lub DMF, nie zawiera w sieci krystalicznej cząsteczek rozpuszczalnika, zaś w drugiej utrata masy wskazuje na obecność dwóch cząsteczek wody.



Rys. 2. Dyfraktogram PXRD dla izokofeiny komercyjnej, krystalizowanej z DMF, metanolu i wody. Pomiar przeprowadzony w dyfraktometrze Empyrean, przy użyciu programu Data Collector; wizualizacja w programie Data Viewer (Malvern Panalytical).

Forma II izokofeiny krystalizuje w grupie $P-1$ z trzema cząsteczkami w niezależnej części komórki elementarnej ($Z'=3$). Jej porównanie ze znaną strukturą przedstawia Rys. 3.



Rys. 3. Struktura formy I (A) oraz II (B) izokofeiny. Wizualizacja przy użyciu programu Mercury (Cambridge Crystallographic Data Centre).

Literatura

- [1] M. Habgood, Form II caffeine: A case study for confirming and predicting disorder in organic crystals. *Cryst. Growth Des.*, **11**(8) (2011) 3600–3608. DOI: 10.1021/cg2005612
- [2] S. L. Price, Why don't we find more polymorphs? *Acta Crystallogr. B*, **69**(4) (2013) 313–328. DOI: 10.1107/S2052519213018861

B-40

DESIGN AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF A METAL-ORGANIC COMPOUND FOR PROSPECTIVE BIOMEDICAL APPLICATIONS

Nadia Kaczorowska, Sabina Jaros

Faculty of Chemistry, Wrocław University, Joliot-Curie 14, 50-300 Wrocław, Poland

The development of advanced polymers and metal–organic frameworks (MOFs) continues to attract significant interest due to their potential applications in drug delivery, disease treatment, and the improvement of patient outcomes. At the same time, the growing challenge posed by pathogenic microorganisms highlights the need for innovative materials with antiviral and antibacterial activity. In this context, the design and structural characterization of new metal-organic architectures are essential for understanding how molecular arrangement influences biological function.

Here, we present a newly synthesized compound with a three-dimensional framework constructed from 1,3,5-triaza-7-phosphaadamantane-7-sulfide and metal-organic linkages. Crystallographic analysis provides detailed insight into its structural organization, revealing features that may be associated with its prospective biological activity and applications. Furthermore, the products obtained are strongly influenced by mechanochemical synthesis parameters, including grinding time and solvent content, which govern the formation of distinct crystalline phases. These structural variations broaden the range of potential therapeutic applications and contribute to the development of new materials for the treatment of select diseases and pathological conditions.

B-41

STRUCTURAL AND UV-VIS CHARACTERIZATION OF ARSENIC(III) PHTHALOCYANINE

Jan Janczak

*Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences,
Okólna 2, 50-442 Wrocław,*

Phthalocyanine and its metal complexes have been known for several decades and are still of great interest due to their versatile applications as dyes and pigments, materials for nonlinear optics, optical data storage, solar cells, charge-generating materials for photocopiers and laser-printers, electrochromic displays, photosensitizers for solar cells and photocatalysts, light organic emitting diodes (OLED), semiconductors and synthetic metals [1]. Strong and intense absorption of light by metal phthalocyanines in the so-called therapeutic window, namely in the red region of visible light (600-900 nm), proved to be promising for photodynamic cancer therapy (PDT) in which they can be used as photosensitizers [2].

The physical and chemical properties of metallophthalocyanines are varied and related to the structure of macrocyclic ligands with extensive delocalization of the π -electron system, as well as to the central metal. Due to the importance of metallophthalocyanines, their investigation was carried out since the beginning of the 20th century and covered almost all metallic/non-metallic elements, but group 15 elements, unlike porphyrins analogs, were essentially ignored. The first reports on phthalocyanines of group 15 concern bismuth(III) and antimony(V) phthalocyanines in the mid-90s and concerned spectroscopic research and some studies on phosphorus(V) phthalocyanines. Spectral investigations on arsenic(III) phthalocyanine derivatives are still very rare, however, there are currently a few reports on structural studies and some properties of a solid state [3]. The variable valency of these metals, including arsenic, depending on the reaction conditions (As^{III} or As^{V} and quite rare compounds of As^{I}) can lead to the formation of various AsPc derivatives. AsPc similarly to SbPc derivatives may be promising candidates for new drugs because they are strong electron donors/acceptors, and similar to SbPc derivatives can readily convert to III/V derivatives under mild conditions [4].

Here, we report synthesis and X-ray structural and spectral characterization of a novel arsenic(III) phthalocyanine complex, $[(\text{As}^{\text{III}}\text{Pc})\text{I}]_2(\text{As}_6\text{I}_6) - \mathbf{1}$, obtained under iodine vapor atmosphere. This arsenic(III) phthalocyanine complex is a unique example of arsenic phthalocyanine complex in which in both parts of the complex the arsenic is in different oxidation state: As^{3+} in $(\text{AsPc})^+$ unit and As^{1+} in a neutral molecule As_6I_6 . In the crystal the arsenic phthalocyanine $(\text{AsPc})^+$ unit is non-planar, the arsenic(III) protrudes out of the cavity by 0.7699(12) Å, forming a saucer shape of Pc unit. The neutral, unique As_6I_6 molecule is centrosymmetric in which there are six As^{1+} joined together to form a six-membered ring As_6I_6 in the chair conformation that is rendered dianionic $\text{As}_6\text{I}_8^{2-}$ by the μ_3 -iodide anions that cap both faces of the ring (Figure 1).

UV-Vis absorption spectra of **1** were taken in CH_2Cl_2 and toluene solutions in the concentration range from 8×10^{-5} to 10^{-6} mol/l. No significant changes related to aggregation in solutions were observed (Figure 2a, b).

B-41

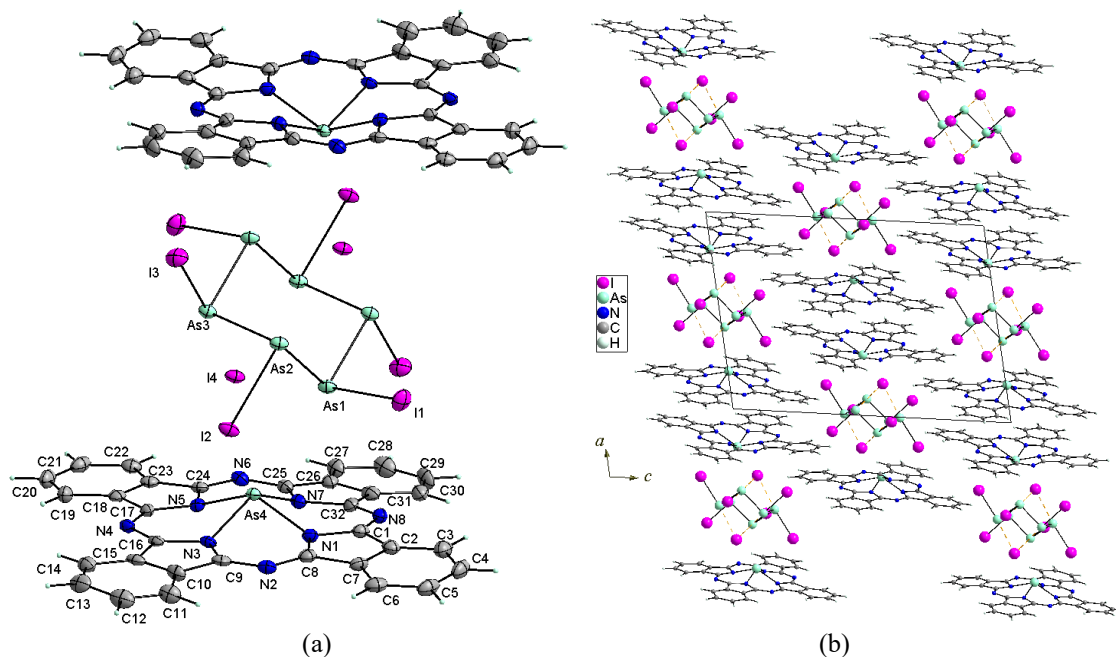


Fig. 1. (a) Molecular structure of $[(As^{III}Pc)I]_2(As_6I_6)$ and (b) crystal packing of $[(As^{III}Pc)I]_2(As_6I_6)$.

Oxidation of $[(As^{III}Pc)I]_2(As_6I_6)$ yields $As^V Pc$ derivative (Figure 2c). Both As^{III} and As^V phthalocyanine derivatives absorb near infrared light (600-900 nm) which should be intriguing with the point of view of potential use as an infrared cut filter for plasma display and silicon photodiodes as well as materials showing strong electron donors/acceptors properties.

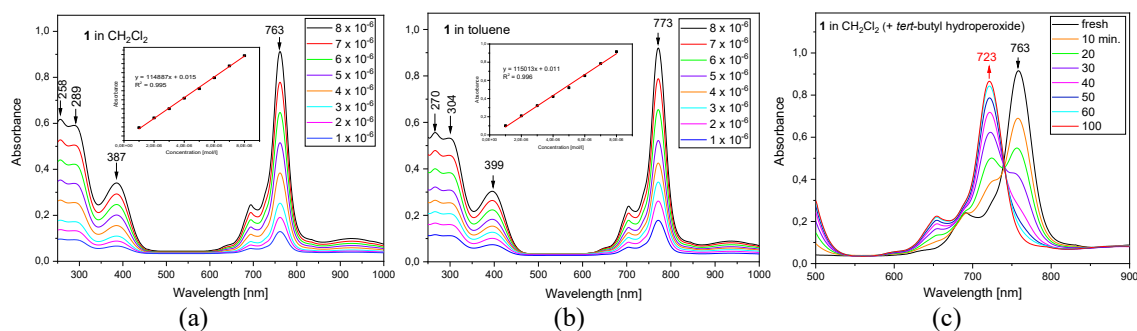


Fig. 2. UV-Vis absorption spectra of $[(As^{III}Pc)I]_2(As_6I_6) - 1$ in CH_2Cl_2 (a) and in toluene (b) and spectral changes during the oxidation of $(AsPc)_2(As_6I_8)$ in CH_2Cl_2 .

Literature

- [1] (a) M. K. Kadish, K. M. Smith, R. Guillard, *The Porphyrins Handbook*; Academic Press, San Diego, 2000–2003; (b) P. Gregory, *J. Porphyrins Phthalocyanines*, **4** (2000) 432–437; (c) T. Inabe, H. Tajima, *Chem. Rev.*, **104** (2004) 5503–4434; (d) H. Lu, N. Kabayashi, *Chem. Rev.*, **116** (2016) 6184–6261.
- [2] (a) R. Bonnett, *Chem Soc. Rev.*, **24** (1995) 19–33; (b) X. Li et al., *Coord. Chem. Rev.*, **379** (2019) 147–160; (c) S. Singh et al., *Chem. Rev.*, **115** (2015) 10261–10306.
- [3] (a) J. Janczak, R. Kubiak, A. Jezierski, *Inorg. Chem.*, **38** (1999) 2043–2049; (b) J. Janczak, Y. Idemori, *Acta Cryst. E*, **58** (2002) m36–m38; (c) J. Janczak, R. Kubiak, *Acta Cryst. C*, **59** (2003) m70–m72; (d) J. Janczak, G. J. Perpeuto, *Acta Cryst. C*, **62** (2006) m45–m47.
- [4] (a) Y. Kagaya, H. Isago, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **70** (1997) 2179–2185; (b) J. P. Fox, D. P. Goldberg, *Inorg. Chem.*, **42** (2003) 8181–8191; (c) N. Kobayashi, T. Furuyama, K. Satoh, *J. Am. Chem. Soc.*, **133** (2011) 19642–19645.

STRUKTURY KRystaliczne ZWIĄZKÓW KOORDYNACYJNYCH SREBRA(I) Z POCHODNĄ ZASADY SCHIFFA

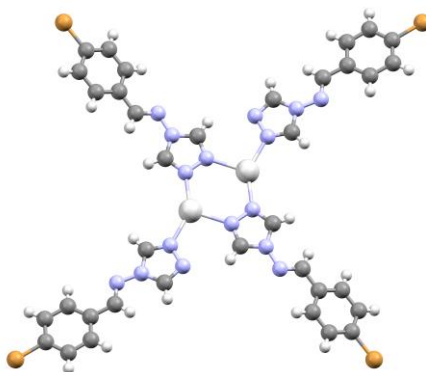
Agata Białońska, Zofia Hajdaczuk

Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

Związki koordynacyjne pochodnych 1,2,4-triazolo-4-aminy cieszą się sporym zainteresowaniem ze względu na znaczny potencjał koordynacyjny triazoli, co umożliwia tworzenie związków w postaci krystalicznej o zróżnicowanej budowie i właściwościach [1,2]. We wcześniejszych latach opisano, w szerokim zakresie, struktury krystaliczne związków koordynacyjnych miedzi(I) z pochodnymi 1,2,4-triazolo-4-aminy z zasadą Schiffa oraz ich zdolność do wymiany cząsteczek gościa [3,4]. Materiały porowate związków koordynacyjnych, które wykazują takie właściwości, znajdują szerokie zastosowanie w katalizie heterogenicznej [5], separacji i magazynowaniu gazów [6], rozdziale molekularnym [7].

Biorąc pod uwagę te doniesienia, zasadne wydaje się dalsze poszukiwanie nowych układów koordynacyjnych na bazie pochodnych triazolu, szczególnie w kontekście ich zdolności do tworzenia struktur zdolnych do wymiany cząsteczek gościa.

W wyniku reakcji tetrafluoroboranu srebra(I) z *N*-[(*E*)-(4-bromofenylometylideno)]-4*H*-1,2,4-triazolo-4-aminą (**4BrPhatrz**), w zmiennych stosunkach molowych, otrzymano kilka związków koordynacyjnych o różnych strukturach krystalicznych. Ich wspólną cechą jest obecność dwurdzeniowych jednostek koordynacyjnych, w których kationy srebra(I) łączą się za pomocą dwóch ligandów **4BrPhatrz** w sposób mostkowy. Jednocześnie **4BrPhatrz** koordynuje również monodentnie, co sprawia, że jednostki przybierają kształt litery X (Rysunek 1). Taka budowa jednostek koordynacyjnych warunkuje powstanie jedno- lub dwuwymiarowych kanałów, w których znajdują się aniony tetrafluoroboranowe lub heksafluorkrzemianowe oraz cząsteczki rozpuszczalnika. Obecność anionów SiF_6^{2-} wynika z reakcji ze szkłem anionów BF_4^- .



Rys. 1. Rysunek dwurdzeniowej jednostki koordynacyjnej $[\text{Ag}_2(4\text{BrPhatrz})_4]^{2+}$.

B-42

Na posterze zostaną zaprezentowane struktury krystaliczne, charakteryzujące się obecnością kanałów lub luk oraz zmiany zachodzące w tych strukturach po wymianie cząsteczek gościa.

Literatura

- [1] G. Aromí, L. A. Barrios, O. Roubeau, P. Gamez, *Chem. Rev.*, **255** (2011) 485.
- [2] J. G. Haasnoot, *Coord. Chem. Rev.*, **200-202** (2000) 131.
- [3] K. Drabent, Z. Ciunik, *Cryst. Growth Des.*, **9** (2009) 3367.
- [4] A. Białońska, K. Drabent, B. Filipowicz, M. Siczek, *Cryst. Eng. Comm.*, **15** (2013) 9859.
- [5] J. Y. Lee, O. K. Farha, J. Roberts, K. A. Scheidt, S. T. Nguyen, J. T. Hupp, *Chem. Soc. Rev.*, **38** (2009) 1248.
- [6] M. P. Suh, H. J. Park, T. K. Prasad, D.-W. Lim, *Chem. Rev.*, **112** (2012) 782.
- [7] H. Wu, R. S. Reali, D. A. Smith, M. C. Trachtenberg, J. Li, *Chem.–Eur. J.*, **16** (2010) 13951.

SOLVENT EFFECT ON THE TAUTOMERIC AND CONFORMATIONAL EQUILIBRIUM IN THIAZOLIDINONES USED AS SCAFFOLDS IN DRUG DESIGN

Bolesław Barszcz¹, Andriy Pyrih², Aneta Pindela², Marcin Kowiel², Adam Mizera¹,
Sylvia Zięba¹, Witold Andrałojć³, Volodymyr Horishny⁴, Roman Lesyk^{4,5},
Andrzej Łapiński¹, Andrzej K. Gzella²

¹ Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Sciences, Smoluchowskiego 17,
60-179 Poznan, Poland

² Department of Organic Chemistry, Poznan University of Medical Sciences,
Rokietnicka 3, Poznan, 60-806, Poland

³ Institute of Bioorganic Chemistry, Polish Academy of Sciences, Noskowskiego 12/14,
Poznan, 61-704, Poland

⁴ Department of Pharmaceutical, Organic and Bioorganic Chemistry, Danylo Halytsky
Lviv National Medical University, Pekarska 69, Lviv, 79010, Ukraine

⁵ Department of Public Health, Dietetics and Lifestyle Disorders, Faculty of Medicine,
University of Information Technology and Management in Rzeszow, Sucharskiego 2,
Rzeszow, 35-225, Poland

The tautomeric-conformational equilibrium in thiazolidinones was discovered (Figs. 1, 2, 3). Two isomeric compounds, 2-phenylamino-1,3-thiazol-4(5H)-one (**1**) and 4-phenylamino-1,3-thiazol-2(5H)-one (**2**), were studied to elucidate the structural changes associated with prototropic tautomerism in the amidine system using experimental and theoretical methods. The investigated compounds were found to exist in the solid state (crystallization from DMF solutions) exclusively in an amino tautomeric form, in which the exocyclic N atom has amine character, while the endocyclic N atom has imine character. In the solid, the phenylamino residue of **1** assumes an antiperiplanar conformation with respect to the thiazolone system. However, in the solution, molecules of **1** exist in amine and imine tautomeric forms, as well as in anti- and synperiplanar conformations. The situation is different for **2**, where the phenylamino residue is arranged in a synperiplanar orientation relative to the thiazolone system in both the solid phase and in DMSO solution. We analyzed isomeric compounds in terms of resonance effects. Additionally, we discussed molecular and vibrational structure, intermolecular interactions in crystals, crystal packing density, and the supramolecular architecture of crystals.

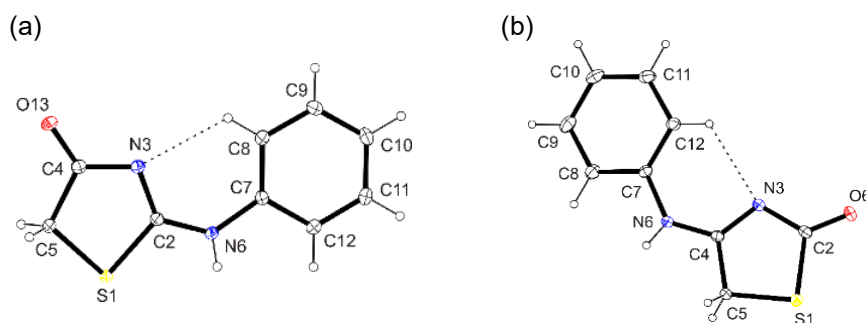


Fig. 1. ORTEP view of the molecules of (a) **1** and (b) **2** showing the atomic labeling schemes.

B-43

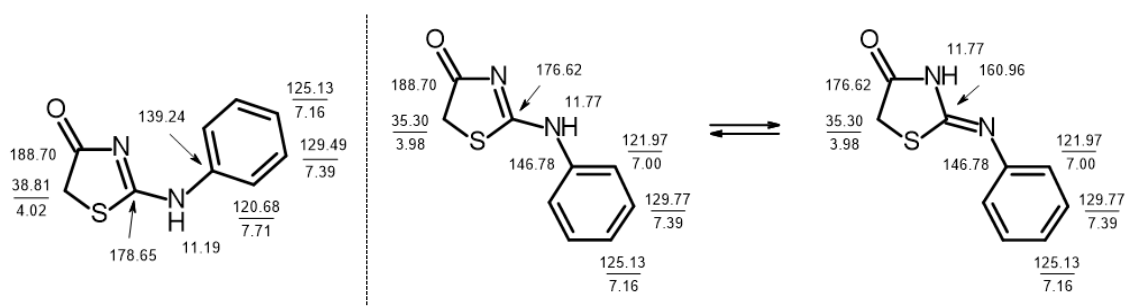


Fig. 2. Chemical shifts for the H and C atoms of compound 1.

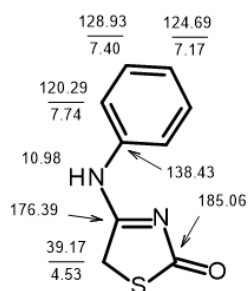


Fig. 3 Chemical shifts for the H and C atoms of compound 2.

CRYSTAL ENGINEERING OF MULTICOMPONENT CRYSTALLINE PHASES WITH CHALLENGING COFORMERS: FIRST CO-CRYSTALS WITH HYDROXYUREA

Szymon Grabowski, Marlena Gryl

*Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie, ul. Gronostajowa 2,
30-387 Kraków*

Hydroxyurea is known as a drug showing anti-tumor activity, used to treat various cancer diseases [1]. The low stability of the hydroxyurea in an aqueous environment has also been noticed in the literature [2], indicating the need for further studies. Hydroxyurea is also an interesting molecule for engineering new multicomponent pharmaceutical solids, as it is composed of functional groups with high propensity to form directional hydrogen bonds. Additionally, its high solubility in water is a promising advantage for pharmaceutical cocrystallization. Despite this, no multicomponent crystalline phases with hydroxyurea are known in the Cambridge Structural Database, even though some trials to obtain co-crystals with this cofomer were described in literature, leading only to obtain new polymorphic form [3].

We obtained two new co-crystals with hydroxyurea: with metacetamol (HuMet) and L-tartaric acid (HuTart). The structures of both materials were determined using a single-crystal X-ray diffraction study and were compared with each other to understand the tendencies for cocrystallization, especially the conformation similarities/differences and the formation of supramolecular synthons (Fig. 1). The results were also referred to the two known polymorphic forms. For the deeper analysis of the molecular behavior of hydroxyurea in the solid state, experimental and theoretical electron density studies were performed for the first hydroxyurea polymorph and HuMet. The topological analysis within the QTAIM [4] framework allowed for an in-depth analysis of the preferences in the formation of intermolecular interactions by hydroxyurea. Based on this study we can conclude that the components capable of forming multicomponent solids with hydroxyurea are the ones that can complement or reinforce the hydroxyurea self-satisfied hydrogen bond system [5].

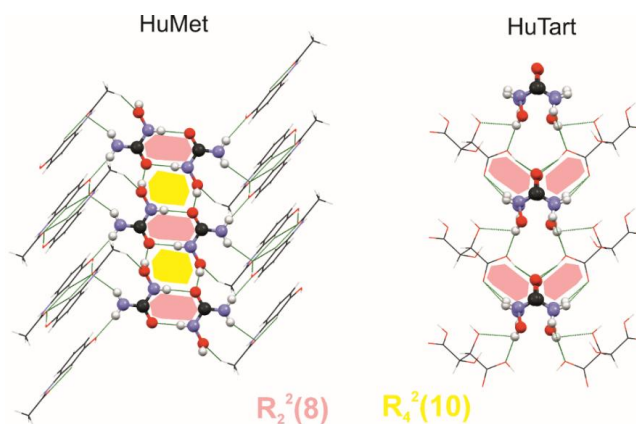


Fig. 1. Supramolecular synthons formed by the hydroxyurea molecule in two co-crystals: with metacetamol (HuMet) and with L-tartaric acid (HuTart).

B-44

Literature

- [1] K. Madaan, D. Kaushik, T. Verma, *Expert Review of Anticancer Therapy*, **12** (2012) 1.
- [2] M. W. Musiałek, D. Rybaczek, *Genes*, **12** (2021) 1096.
- [3] S. K. Rai, S. Tothadi, M. Arhangelskis, C. P. George, R. G. Gonnade, A. K. Nangia, *CrystEngComm*, **25** (2023) 2712.
- [4] R. Bader (1990), *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*, Oxford University Press.
- [5] S. Grabowski, M. Gryl, in preparation for publication.

OPTIMIZATION OF THE SYNTHESIS OF Br/F-SUBSTITUTED B-DIKETONE BUILDING BLOCKS ASSISTED BY X-RAY CRYSTALLOGRAPHY

Mateusz Goldyn^{*1,2}, Artur R. Stefankiewicz^{1,2}

¹ *Center for Advanced Technologies, Adam Mickiewicz University in Poznań,
Uniwersytetu Poznańskiego 10, 61-614, Poznań, Poland*

² *Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University in Poznań, Uniwersytetu
Poznańskiego 8, 61-614, Poznań, Poland*

**e-mail: mateusz.goldyn@amu.edu.pl*

β -Diketones constitute an important class of multifunctional organic compounds widely employed in coordination and supramolecular chemistry due to their versatile coordination properties and structural tunability [1]. These systems exhibit keto–enol tautomerism, which strongly influences their reactivity, coordination behavior, and physicochemical properties. Upon deprotonation, β -diketones form stable O,O'–chelating ligands capable of coordinating a broad range of metal ions, enabling the construction of coordination complexes, metalloligands, cages, polymers, and extended supramolecular architectures. Owing to these features, β -diketonate-based systems have attracted considerable attention in catalysis [2-4], encapsulation [5,6], sensing [7], magnetism [8], luminescence [7, 9], and functional materials research.

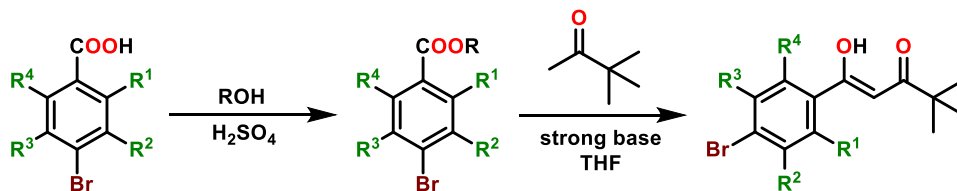


Fig. 1. Scheme of transformations leading to fluorinated β -diketone derivatives.

In this work, particular attention was devoted to the synthesis and structural characterization of Br/F-substituted β -diketone derivatives bearing fluorine substituents in different positions of the aromatic ring (Fig. 1). The introduction of bromine and fluorine atoms was intended not only to modulate the electronic properties of the ligands but also to create platforms suitable for the formation of supramolecular systems governed by halogen bonding interactions. During the optimization of the synthetic procedures, single-crystal X-ray diffraction, together with 1H NMR spectroscopy, proved indispensable for the identification of reaction products. This enabled a detailed understanding of the underlying reaction pathways and facilitated the rational adjustment of reaction conditions toward the selective formation of the desired compounds.

The Claisen condensation step proved to be the most challenging part of the synthetic procedure, with the reaction outcome being strongly influenced by the nature of the ester, the choice of base, and the reaction temperature. Careful pH control during the extraction procedure was also crucial, as it enabled protonation of the β -diketonate

B-45

species and efficient isolation of the neutral β -diketone form, whereas excessively high pH led to hydrolysis of the β -diketone system.

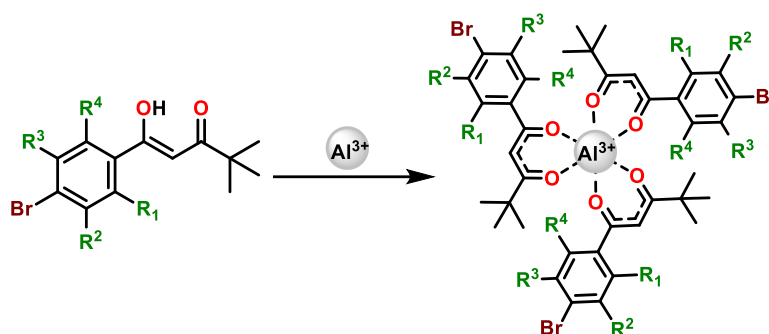


Fig. 2. Synthesis of an Al(III)-based metalloligand via functionalization of a Br/F-substituted β -diketone precursor.

In the subsequent stage, the obtained ligands were functionalized with aluminum(III) to generate metalloligands (Fig. 2) designed as precursors for the construction of larger supramolecular architectures based on halogen interactions. Particular attention was devoted to the choice of solvent, which proved to be a key factor governing the course of the complexation process and the formation of the desired metalloligands.

Acknowledgements

The authors acknowledge the National Science Centre and Adam Mickiewicz University (the Initiative of Excellence – Research University (IDUB) program) for financial support.

Literature

- [1] G. Kurpik, W. Wachowicz, A. Walczak, J. Harrowfield, A. R. Stefankiewicz, *Pyridyl- β -diketonates: Versatile ligands for generation of functional nanostructures*, *Coord. Chem. Rev.*, **2025**, 539, 216762.
- [2] G. Kurpik, A. Walczak, G. Markiewicz, J. Harrowfield, A. R. Stefankiewicz, Enhanced catalytic performance derived from coordination-driven structural switching between homometallic complexes and heterometallic polymeric materials. *Nanoscale*, **15** (2023) 9543–9550.
- [3] G. Kurpik, A. Walczak, M. Gołdyn, J. Harrowfield, A. R. Stefankiewicz, Pd(II) Complexes with Pyridine Ligands: Substituent Effects on the NMR Data, Crystal Structures, and Catalytic Activity. *Inorg. Chem.*, **61** (2022) 14019–14029.
- [4] J. F. Wunsch, L. Eberle, J. P. Mullen, F. Rominger, M. Rudolph, A. S. K. Hashmi, Gem-Diaurated Gold(III) Complexes: Synthesis, Structure, Auophilic Interaction, and Catalytic Activity. *Inorg. Chem.*, **61** (2022) 3508–3515.
- [5] G.-L. Wang, Y.-J. Lin, H. Berke, G.-X. Jin, Two-Step Assembly of Multinuclear Metallacycles with Half-Sandwich Ir, Rh, and Ru Fragments for Counteranion Encapsulation. *Inorg. Chem.*, **49** (2010) 2193–2201.
- [6] Y. Zhang, L. Zhang, Y. Lin, G. Jin, Mixed-Metal Coordination Cages Constructed with Pyridyl-Functionalized β -Diketonate Metalloligands: Syntheses, Structures and Host–Guest Properties. *Chem. Eur. J.*, **21** (2015) 14893–14900.
- [7] G.-G. Hou, Y. Liu, Q.-K. Liu, J.-P. Ma, Y.-B. Dong, NbO lattice MOFs based on octahedral M(II) and ditopic pyridyl substituted diketonate ligands: structure, encapsulation and guest-driven luminescent property. *Chem. Commun.*, **47** (2011) 10731.
- [8] P.-D. Mao, N.-T. Yao, H.-Y. Sun, F.-F. Yan, Y.-Q. Zhang, Y.-S. Meng, T. Liu, Design of Heterometallic {LnIII–MV} (Ln = Dy, Er; M = W, Mo) Molecular Nanomagnets: Protonation Induced Structural Diversification. *Cryst Growth Des*, **23** (2022) 450–464.
- [9] J.-H. Olivier, J. Harrowfield, R. Ziessel, 3-Substituted-2,4-pentanedionates: ligands for photoactive supramolecular assemblies. *Chem. Commun.*, **47** (2011) 11176.

WPLYW PRZYJĘTEJ SYMETRII NA UDOKŁADNIENIE ANOMALNYCH CZYNNIKÓW ROZPRASZANIA

Zuzanna Gackowska¹, Michał Terlecki¹, Anna Makal²

¹ Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska, 00-664 Warszawa, Polska

² Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, 02-089, Warszawa, Polska

Wyznaczenie anomalnych czynników rozpraszania (*anomalous dispersion refinement* - ADR) może znacząco poprawić udokładnienie struktury krystalograficznej. Polega ono na uwzględnieniu nieelastycznego rozpraszania, występującego w eksperymencie dyfrakcyjnym dla danej długości fali, wyrażonego dla poszczególnego atomu za pomocą czynników f' (część rzeczywista) oraz f'' (część urojona). Mają one szczególne znaczenie, gdy wartość energii fali użytej w pomiarze dyfrakcyjnym, znajduje się w pobliżu progu absorpcji któregoś z atomów wchodzących w skład kryształu. Jednak ostatnie badania pokazują, że mogą one służyć poprawie modelu struktury również daleko od progu absorpcji [1]. Wiadomo też, że modelowany na podstawie pomiaru dyfrakcyjnego czynnik f'' odpowiedzialny za część absorpcyjną padającego promieniowania odwzorowuje rzeczywistą absorpcję zmierzoną za pomocą XAS (X-ray Absorption Spectroscopy) [2]. Zatem oprócz poprawy współczynników udokładnienia struktury, uwzględnienie tych parametrów niesie obiecujące możliwości, aby ze zwykłego pomiaru krystalograficznego o dobrej rozdzielczości uzyskać jak najwięcej informacji o centrach metalicznych w badanej strukturze. Może być to bardzo użyteczne narzędzie przy określaniu stopnia utlenienia i struktury elektronowej metali w związkach metaloorganicznych, materiałach funkcjonalnych, czy też metaloproteinach [3]. Aby wyciągnięte wnioski były wiarygodne, należy lepiej zrozumieć jaki wpływ na wartości modelowanych parametrów mają założenia przyjęte podczas rozwiązywania oraz udokładnienia struktury. Przykładowo, założenie średniego położenia atomu w pozycji szczególnej, gdy w rzeczywistości mamy do czynienia z nieporządkiem, może zaburzać wartości liczonych współczynników.

W niniejszej pracy porównano wpływ obecności szczególnych elementów symetrii na wyznaczone wartości f' oraz f'' w modelowym wysoko symetrycznym klastrze oksocynkowym $[\text{Zn}_4(\mu_4\text{-O})(\text{HNC}(\text{O})\text{Ph})_6]$.

Literatura

- [1] F. Meurer, G. Morrison, B. Hischa, H. C. Zur Loye, C. Hennig, M. Bodensteiner, Improvement of single-crystal structures of very heavy element compounds by refining anomalous dispersion parameters. *Inorganic Chemistry*, **63**(34) (2024) 15784–15790.
- [2] F. Meurer, O. V. Dolomanov, C. Hennig, N. Peyerimhoff, F. Kleemiss, H. Puschmann, M. Bodensteiner, Refinement of anomalous dispersion correction parameters in single-crystal structure determinations. *IUCrJ*, **9**(5) (2022) 604–609.
- [3] O. Einsle, S. L. Andrade, H. Dobbek, J. Meyer, D. C. Rees, Assignment of individual metal redox states in a metalloprotein by crystallographic refinement at multiple X-ray wavelengths. *Journal of the American Chemical Society*, **129**(8) (2007) 2210–2211.

CRYSTAL STRUCTURE OF COPPER ACECLOFENAC COMPLEX

Patrycja Schab, Karolina Kafarska, Michał Gacki, Anna Pietrzak, Wojciech Wolf

Institute of General and Ecological Chemistry, Faculty of Chemistry, Lodz University of Technology, 116 Zeromskiego Street, 90-924 Lodz, Poland

Nonsteroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) constitute a widely used class of pharmacologically active compounds employed in the treatment of pain, inflammation, and fever. However, their clinical application is often limited by significant adverse effects, including gastrointestinal, renal, and cardiovascular complications [1]. Aceclofenac (HacI), a phenylacetic acid derivative, is a commonly prescribed NSAID exhibiting anti-inflammatory and analgesic activity with improved gastrointestinal tolerability compared to some classical drugs [2]. Nevertheless, its use may still be associated with dose-dependent adverse effects, which motivates the search for modified forms with improved safety profiles. In this context, metal coordination has emerged as a promising strategy to modulate the physicochemical and biological properties of NSAIDs, frequently leading to enhanced activity and reduced toxicity compared to the parent drugs [3].

In this contribution, we report the crystal structure of a dinuclear copper(II) complex with aceclofenac [$\text{Cu}_2(\text{acl})_4(\text{H}_2\text{O})_2$]. The compound crystallizes in the monoclinic space group $P2_1/n$ and features a characteristic paddlewheel-type core, in which two Cu(II) centers are bridged by aceclofenate ligands. Each metal center adopts a five-coordinate, distorted square pyramidal environment defined by carboxylate oxygen atoms and a terminal water molecule. The crystal packing is governed by an extended hydrogen-bonding network involving coordinated water molecules and carboxylate groups, which link discrete dinuclear units into a supramolecular architecture further stabilized by weak intermolecular interactions.

Literature

- [1] P. Jiao Yi et al., *PLoS ONE*, **20**(5) (2025) e0320379.
- [2] G. Iolascon et al., *J. Pain Res.*, **30**(14) (2021) 3651.
- [3] A. C. F. Santos et al., *Int. J. Mol. Sci.*, **23** (2022) 2855.

COMPLEX POLYTYPISM BEHIND DIFFUSE SCATTERING AND IMPACT OF THE LOCAL STRUCTURE ON THE JAHN TELLER DISTORTION IN $\text{Cu}_4\text{SO}_4(\text{OH})_6$

**Piotr Reinhardt¹, Wojciech A. Sławiński¹, Jan Parafiniuk², Szymon Sutula³,
Tomasz Poręba⁴, Mohamed Mezouar⁵, Pierre Fertey⁶, Krzysztof Woźniak¹**

¹ Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Pasteura 1, 02-093 Warsaw, Poland

² Institute of Geochemistry, Mineralogy and Petrology, Department of Geology,
University of Warsaw, Zwirki i Wigury 93, Warszawa 02-089, Poland

³ Centre of New Technologies, University of Warsaw, S. Banacha 2c, 02-097,
Warszawa, Poland

⁴ Laboratory of Quantum Magnetism, Institute of Physics, 'Ecole Polytechnique
Fédérale de Lausanne, Lausanne CH-1015, Switzerland

⁵ ID27 High-Pressure Beamline, European Synchrotron Radiation Facility (ESRF),
71 avenue des Martyrs, 38000 Grenoble, France

⁶ Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, d'epartementale 128,
91190 Saint-Aubin, France

Brochantite mineral, $\text{Cu}_4\text{SO}_4(\text{OH})_6$, is one of the most common basic copper salts named after geologist A. J. M. Brochant de Villiers [1] and characterized by an emerald green color (Fig. 1a). It is the product of the corrosion of copper metals and alloys. Its layered structure leads to the formation of patina on monuments, such as the Statue of Liberty, giving a characteristic green color [2,3]. It is the most frequent alteration product in urban and industrial environments [4]. The mineral exhibits unique physicochemical properties that are of great interest for several disciplines, leading to a wide range of applications. $\text{Cu}_4\text{SO}_4(\text{OH})_6$ shows promising activity against a variety of agronomically relevant bacteria and fungi [5]. It has also been suggested that brochantite triggers the degradation of organic pollutants [3]. Moreover, the neutron powder data revealed the presence of ferromagnetic chains coupled antiferromagnetically within the brochantite structure.

Brochantite consists of Cu-polyhedral chains along the *c*-axis, which are connected to form sheets (Fig. 1c). The SO_4^{2-} tetrahedra and hydroxyl groups link these corrugated sheets to one another through Cu-O and hydrogen bonds (Fig. 1b, c). It leads to a very complex crystal structure, consisting of stacking layers that can be organized in many geometrically and energetically equivalent ways with respect to one another (Fig. 1c, d). The effect demonstrates the Order-Disorder (OD) character of brochantite and the possibility of different arrangements of neighboring layers. This results in the existence of many brochantite polytypes, characterized by stacking faults. Polytypism is a type of polymorphism in which different polytypes share the same structure of the individual layers, whereas the layer-stacking motif differs. Surprisingly, although brochantite can crystallize in many complex layered structures, only two known polytypes have been reported to date. The first, MDO_1 , was determined in 1959 by Cocco & Mazzi [6] using the mineral from Tsumeb (Namibia). They have confirmed the monoclinic space group $P2_1/a$ previously suggested by Palache in 1939 [7]. The second polytype, MDO_2 was first derived by Merlino [4] for the sample from Capo Calamita (Italy), which was described in the non-standard monoclinic space group $P2_1/n11$ to allow

B-48

an easier comparison between the two polytypes. They suggested that both polytypes (MDO_1 and MDO_2) can be distinguished by the intensity and positions of the reflections with

$l = 2n+1$ in the reciprocal space. They were also the first to observe diffuse scattering across the aforementioned $l = 2n+1$ reflections in a well-defined (axis a) direction. However, they did not determine the accurate position or site occupancy for the disordered SO_4^{2-} anions and did not interpret the origin of diffuse scattering along with the occurrence of the complex twinning for brochantite.

Here, we present record-breaking **11** newly discovered polytypes of brochantite, obtained from natural samples at both ambient and high-pressure conditions, using home-lab X-ray diffraction along with synchrotron sources, and 3D electron diffraction. As a result, we determined the stacking sequences and/or site occupancies of SO_4^{2-} anions for each newly discovered polytype. Moreover, for the first time, we showed that complex polytypism and the local structure of presented stacking faults can impact the Jahn-Teller distortions for the CuO_6 octahedra in brochantite structure.

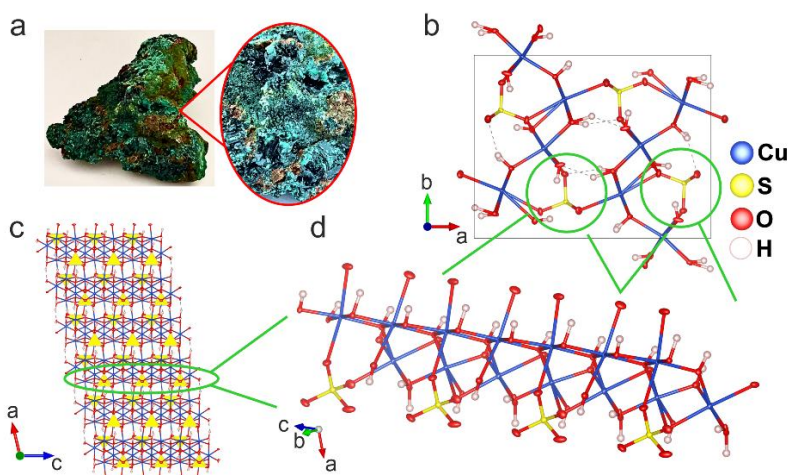


Fig. 1. (a) Sample of brochantite mineral from Touissit, Morocco. Small pieces of this sample were studied in this work. (b) Atomic arrangement within the unit cell of brochantite at room-temperature conditions. (c) Layered crystal structure of the ordered MDO_1 polytype of brochantite mineral. Yellow polyhedra represent SO_4^{2-} anions. (d) An individual layer within the brochantite crystal structure.

Literature

- [1] T. L. Woods, R. M. Garrels, Use of oxidized copper minerals as environmental indicators. *Appl. Geochem.*, **1** (1986) 181–187.
- [2] R. A. Livingston, Influence of the environment on the patina of the Statue of Liberty. *Environ. Sci. Technol.*, **25** (1991) 1400–1408.
- [3] W. Dong et al., Rapid removal of organic pollutants by a novel persulfate/brochantite system: Mechanism and implication. *J. Colloid Interface Sci.*, **585** (2021) 400–407.
- [4] S. Merlino, N. Perchiazzi, D. Franco, Brochantite, $Cu_4SO_4(OH)_6$: OD character, polytypism and crystal structures. *Eur. J. Mineral.*, **15** (2003) 267–275.
- [5] V. Sinisi et al., A Green Approach to Copper-Containing Pesticides: Antimicrobial and Antifungal Activity of Brochantite Supported on Lignin for the Development of Biobased Plant Protection Products. *ACS Sustain. Chem. Eng.*, **7** (2019) 3213–3221.
- [6] G. Cocco, F. Mazzi, La struttura della brochantite. *Period. Mineral.*, **28** (1959) 121–149.
- [7] C. Palache, Brochantite. *Am. Mineral.*, **24** (1939) 463–481.

OKSYMY JAKO NIEDOCENIANE KOFORMERY W PROJEKTOWANIU NOWYCH FAZ KRystalicznych AMRINONU

Krzysztof Dubert, Agnieszka Skórska-Stania

*Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej, Zakład Krystalochemii
i Krystalofizyki, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie*

Nowe fazy krystaliczne aktywnych składników farmaceutycznych, takie jak sole i kokryształy, stanowią istotny obszar badań inżynierii krystalicznej, umożliwiając modyfikacje właściwości fizykochemicznych leków bez zmiany ich struktury chemicznej [1–3]. Celem pracy było zaprojektowanie, otrzymanie i analiza strukturalna nowych faz krystalicznych amrinonu - leku o działaniu inotropowym dodatnim, należącego do inhibitorów fosfodiesterazy typu 3.

Jako potencjalne koformery wybrano związki zawierające grupę oksymową, które ze względu na obecność donorowych i akceptorowych centrów wiązań wodorowych mogą uczestniczyć w tworzeniu stabilnych syntonów supramolekularnych [4,5]. Pomimo interesujących właściwości strukturotwórczych oksymy były dotychczas stosunkowo rzadko wykorzystywane w projektowaniu kokryształów farmaceutycznych, co dodatkowo uzasadniło wybór tej ciekawej klasy związków.

Dobór koformatorów poprzedzono analizą map molekularnego potencjału elektrostatycznego MEP, oceną możliwości transferu elektronu na podstawie kryterium ΔpK_a oraz zastosowaniem zasad inżynierii krystalicznej, w tym koncepcji syntonów supramolekularnych [6–8]. Przeprowadzono serię krystalizacji amrinonu z wybranymi oksymami, obejmującymi m.in. cyjano(hydroksyimino)octan etylu, pirydyno-2-aldoksym oraz pochodne nitrobenzaldoksymu i nitrobenzamidoksymu.

W wyniku kokrysztalizacji amrinonu z cyjano(hydroksyimino)octanem etylu otrzymano nowy kokryształ o stosunku stechiometrycznym 1:2. Analiza rentgenowska monokryształu (SCXRD) wykazała obecność złożonej sieci wiązań wodorowych oraz dodatkowych oddziaływań niekowalencyjnych stabilizujących strukturę krystaliczną. Uzupełniająca analiza powierzchni Hirshfelda oraz wykresów fingerprint pozwoliła na ilościowe określenie udziału poszczególnych kontaktów międzycząsteczkowych, potwierdzając dominującą rolę wiązań wodorowych $O\cdots H/H\cdots O$ i $N\cdots H/H\cdots N$ oraz istotny udział oddziaływań $\pi-\pi$ w stabilizacji sieci krystalicznej.

Uzyskane wyniki pokazują, że oksymy, a w szczególności cyjanooksymy, stanowią efektywną klasę koformatorów w projektowaniu nowych form krystalicznych farmaceutyków. Obserwowana zdolność tych związków do tworzenia konkurujących motywów oddziaływań podkreśla ich potencjał w kształtowaniu architektury supramolekularnej i rozszerza zakres narzędzi wykorzystywanych w inżynierii krystalicznej substancji aktywnych.

Literatura

- [1] S. Aitipamula, R. Banerjee, A. K. Bansal, et al. Polymorphs, Salts, and Cocrystals: What's in a Name? *Cryst. Growth Des.*, **12** (2012) 2147–2152.
- [2] M. Singh, H. Barua, V. G. S. S. Jyothi, et al., Cocrystals by Design: A Rational Coformer Selection Approach for Tackling the API Problems. *Pharmaceutics*, **15** (2023) 1161.

B-49

- [3] G. Bolla, A. Nangia, Pharmaceutical Cocrystals: Walking the Talk. *Chem. Commun.*, **52** (2016) 8342–8360.
- [4] A. Tarai, B. A. Nath, Review on Oxime Functionality: An Ordinary Functional Group with Significant Impacts in Supramolecular Chemistry. *Chem. Commun.*, **60** (2024) 7266–7287.
- [5] C. B. Aakeröy, A. S. Sinha, K. N. Epa, P. D. Chopade, M. M. Smith, J. Desper, Structural Chemistry of Oximes. *Cryst. Growth Des.*, **13**(6) (2013) 2687–2695.
- [6] G. R. Desiraju, Supramolecular Synthons in Crystal Engineering-A New Organic Synthesis. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **34** (1995) 2311–2327.
- [7] M. Rodrigues, B. Baptista, J. A. Lopes, M. C. Sarraguça, Pharmaceutical Cocrystallization Techniques. Advances and Challenges. *Int. J. Pharm.*, **547**(2) (2018) 404–420.
- [8] Y. Deng, S. Liu, Y. Jiang, I. C. B. Martins, T. Rades, Recent Advances in Co-Former Screening and Formation Prediction of Multicomponent Solid Forms of Low Molecular Weight Drugs. *Pharmaceutics* (2023).

INCLUSION COMPLEXES OF CYCLODEXTRINS WITH BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS

**Patryk Czapnik^{1,2}, Angelika Adamus-Grabicka³, Elżbieta Budzisz⁴,
Magdalena Malecka¹**

¹ *University of Lodz, Faculty of Chemistry, Department of Physical Chemistry,
Pomorska 163/165, 90-236 Łódź*

² *University of Lodz, Doctoral School of Exact and Natural Sciences,
Matejki 21/23, 90-237 Łódź*

³ *Medical University of Lodz Faculty of Pharmacy, Department of Medical Chemistry,
Muszyńskiego 1, 90-151 Łódź*

⁴ *Medical University of Lodz Faculty of Pharmacy, Department of Cosmetology,
Muszyńskiego 1, 90-151 Łódź*

The aim of this study was to synthesise and determine the crystal structures of α - and β -cyclodextrin inclusion complexes with hydroquinone and isonicotinamide using X-ray structural analysis. We compared the crystal structures and differences in the crystal packing (Fig. 1). We also performed energy framework calculations to better understand the forces determining the packing of molecules in the crystal lattice [1]. Analysis of the components of total energy (E_{tot}), Coulomb energy (E_{ele}) and dispersion energy (E_{dys}) helped us to investigate the contribution of electrostatic and non-electrostatic interactions to the stabilisation of the crystal structures of the inclusion complexes (Fig. 2).

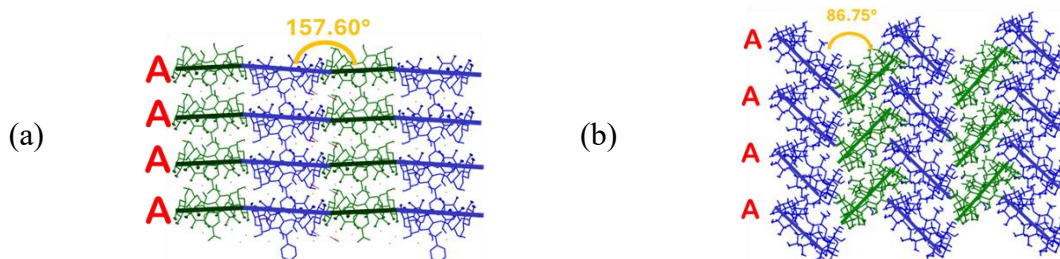


Fig. 1. Differences in arrangements of inclusion complexes of (a) α -cyclodextrin with isonicotinamide, (b) β -cyclodextrin with isonicotinamide.

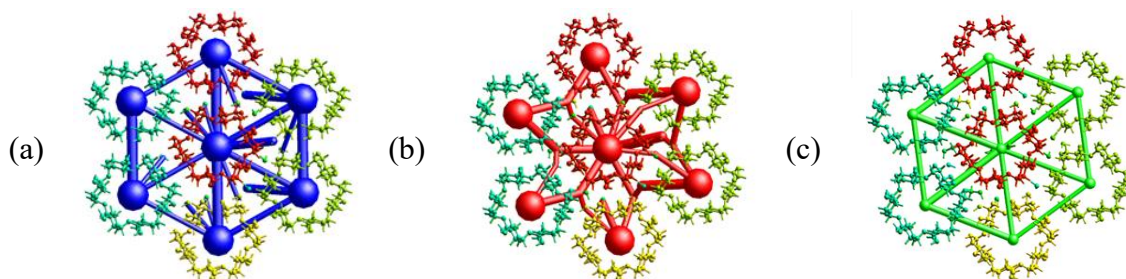


Fig. 2. Differences in arrangements of (a) total energy, (b) Coulomb energy, (c) dispersion energy, in one of the obtained inclusion complex of α -cyclodextrin with isonicotinamide.

Literature

[1] P. R. Spackman, M. J. Turner, *J. Appl. Cryst.*, **54** (2021) 1006–1011.

SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF ATOMICALLY PRECISE SILVER NANOCCLUSERS

Łukasz Cieszyński^{1,2}, Anna Makal²

¹ *Uniwersytet Warszawski, Kolegium MISMaP, ul. Stefana Banacha 2C, 02-097 Warszawa*

² *Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa*

Atomically precise silver nanoclusters ranging from 0.5 to 2 nm and containing from a few to hundreds of metal atoms represent a new class of nanomaterials with well-defined compositions. Because of their relatively small size, their energy levels are well resolved, in comparison to much bigger (2-100 nm) metal nanoparticles, leading to molecular properties such as photoluminescence (PL) dependent on the nanocluster size [1]. Their PL properties find applications in fields such as bioimaging or even photovoltaics [2].

In this work we present crystal structures for three types of silver nanoclusters:

- $\text{Ag}_{62}\text{S}_{13}(\text{StBu})_{32}(\text{CF}_3\text{COO})_4$ crystalizing in *P*-1 spacegroup
- $\text{Ag}_{50}\text{S}_{13}(\text{StBu})_{20}(\text{CF}_3\text{COO})_4$ crystalizing in *Fm*-*3c* spacegroup
- $\text{Ag}_{31}\text{S}_3(\text{StBu})_{17}(\text{CF}_3\text{COO})_8$ crystalizing in *P2*₁*2*₁*2*₁ spacegroup

obtained by means of single crystal X-ray diffraction.

Based on obtained structural models, we discuss their core-shell interactions and attempt to connect them with their photophysical properties such as absorption and emission spectra in solution.

The observed geometries and interatomic interactions present in these silver nanoclusters depend on the reaction conditions. Studies on the subject are important for better understanding of mechanisms governing the cluster formation. This can provide guidelines for future, more reliable synthetic protocols of nanoclusters with desired photophysical properties.

Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge Prof. Christophe Vande Velde from the University of Antwerp for his assistance with the measurements. This work was supported by funding obtained through the Erasmus+ programme.

Literature

- [1] Jie Yang, Rongchao Jin, New Advances in Atomically Precise Silver Nanoclusters. *ACS Materials Letters*, **1**(4) (2019) 482–489. DOI: 10.1021/acsmaterialslett.9b00246
- [2] Muhammad A. Abbas, Seog Joon Yoon, Hahkjoon Kim, Junghyun Lee, Prashant V. Kamat, Jin Ho Bang, Ag(I)-Thiolate-Protected Silver Nanoclusters for Solar Cells: Electrochemical and Spectroscopic Look into the Photoelectrode/Electrolyte Interface. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **11**(13) (2019) 12492–12503. DOI: 10.1021/acsami.9b00049

NEW POLYMORPHIC FORMS OF ETHYL 4-METHYL-2-PHENYL-6-SULFANYLIDENE-1,6-DIHYDROPYRIMIDINE-5-CARBOXYLATE AND ITS UNUSUAL REACTION WITH AMINOPYRIDINES

Iwona Bryndal¹, Anna Pyra², Marcin Mączyński¹

¹ *Department of Organic Chemistry and Pharmaceutical Technology, Faculty of Pharmacy, Wrocław Medical University, 211A Borowska, 50-556 Wrocław*

² *Faculty of Chemistry, University of Wrocław, 14 Joliot-Curie, 50-383 Wrocław*

Due to its wide distribution in nature as a component of natural compounds, including nucleic acids and many other synthetic active substances, pyrimidine has become a well-known potent pharmacophore [1]. Pyridinopyrimidine derivatives are known for their broad biological activity [2] and can be found in drugs commonly used in medicine, including those with anticancer [3] and antimicrobial activities [4].

In our group, the group of 2-phenyl-6-methylpyrimidine-4-amine derivatives studied so far, in most cases contained various aryl/alkyl groups substituted to the amino group, moreover, the presence of the -OH group or the -C=N- bond in position 5 of the pyrimidine ring influences the increase of anticancer activity [5-7].

We have previously reported the synthesis, biological activity, and crystal structures of two polymorphic forms of 4-methyl-2-phenyl-5*H*-pyrido[1,2-*a*]pyrimido[4,5-*d*]pyrimidin-5-one (**3**) obtained by condensation of ethyl 4-methyl-2-phenyl-6-sulfanylidene-1,6-dihydropyrimidine-5-carboxylate (**1**) with 2-aminopyridine [8]. The structures of compounds with different substituents on the aryl ring of analogs of ethyl 4-anilino-6-methyl-2-phenylpyrimidine-5-carboxylate (**2**) have also been studied [9]. Here we present the structural characterization of the another compound, 4-(ethyl-sulfanyl)-6-methyl-2-phenyl-*N*-(pyridin-4-yl)pyrimidine-5-carboxamide (**4**), resulting from the unusual condensation of compound (**1**) with 4-aminopyridine. The crystal structure analysis revealed that compound (**4**) belongs to the orthorhombic crystal system with the *P2₁2₁2₁* space group, and crystallizes with two molecules in the asymmetric part of the unit cell. In the structure of (**4**), molecules are connected to others mainly by N-H...N interactions.

Additionally, here we also show the three-dimensional structures of starting compound (**1**), which can occur in two tautomeric forms, thiol (ethyl 4-methyl-2-phenyl-6-sulfanylpyrimidine-5-carboxylate) or thione (ethyl 4-methyl-2-phenyl-6-sulfanylidene-1,6-dihydropyrimidine-5-carboxylate) (Fig. 1).

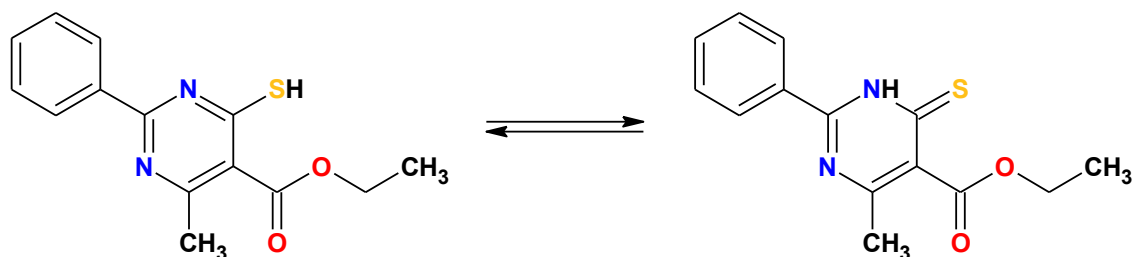


Fig. 1. The tautomeric forms of compound (**1**): (left) thiol and (right) thion.

B-52

It turned out that compound (**1**) exists in several polymorphic forms. The crystal structure of the first polymorph of compound (**1**), herein referred to as (**1a**), was previously described by Cunha *et al.* (2007) [10], and shows that it crystallized in the monoclinic space group $P2_1/c$, with one symmetry-independent molecule in the asymmetric unit, in its thionic form as a monohydrate. We obtained two new polymorphs, denoted as (**1b**) and (**1c**), which are not hydrated. The same tautomeric form of compound (**1**) was observed in the crystal structures of three polymorphs. Polymorph (**1b**) crystallizes also in the monoclinic space group $P2_1/c$, with one symmetry-independent molecule in the asymmetric part of the unit cell (Fig. 2). In the structure of this polymorph, molecules are connected to others mainly by N–H \cdots O interactions. In contrast to them, it was found that polymorph (**1c**) crystallizes in the monoclinic space group $P2_1/n$, with one symmetry-independent molecule in the asymmetric unit, and adjacent molecules are connected to others mainly by N–H \cdots S interactions.

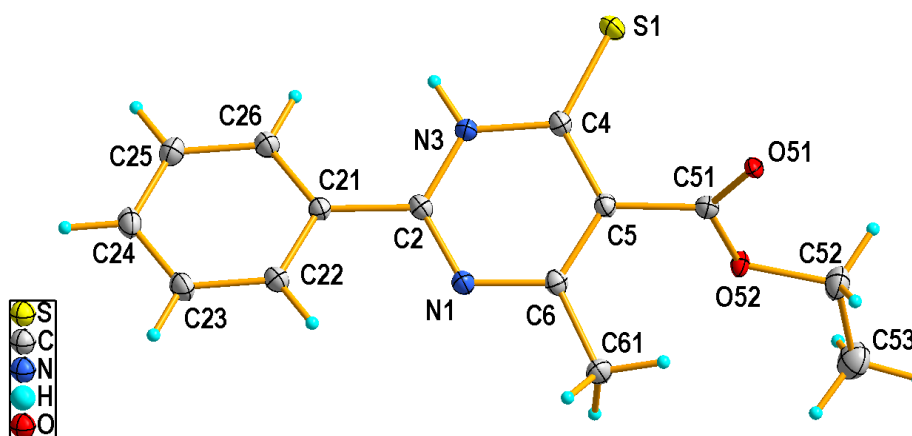


Fig. 2. The X-ray structure of polymorph (**1b**), showing the atom-numbering scheme. Displacement ellipsoids are drawn at the 50% probability level. H atoms are shown as small spheres of arbitrary radii.

Literature

- [1] T. Eicher, S. Hauptmann, A. Speicher, (2003). In *The Chemistry of Heterocycles*. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- [2] S. Kumar, B. Narasimhan, *Chem. Cent. J.*, **12** (2018) 38.
- [2] V. Sharma, N. Chitranshi, A.K. Agarwal, *Int. J. Med. Chem.*, **2014** (2014) 202784.
- [4] Zhuang, J.; Ma, S. Recent Development of Pyrimidine-Containing Antimicrobial Agents. *ChemMedChem*, **15** (2020) 1875.
- [5] M. Stolarczyk, A. Matera-Witkiewicz, A. Wolska, M. Krupińska, A. Mikołajczyk, A. Pyra, I. Bryndal, *Materials*, **14** (2021) 6916.
- [6] M. Stolarczyk, A. Wolska, A. Mikołajczyk, I. Bryndal, J. Cieplik, T. Lis, A. Matera-Witkiewicz, *Molecules*, **26** (2021) 2296.
- [7] I. Bryndal, M. Stolarczyk, A. Mikołajczyk, M. Krupińska, A. Pyra, M. Mączyński, A. Matera-Witkiewicz, *Int. J. Mol. Sci.*, **25** (2024) 2076.
- [8] I. Bryndal, A. Pyra, M. Mączyński, data presented during the 64th Polish Crystallographic Meeting (2023).
- [9] I. Bryndal, A. Pyra, data presented during the 66th Polish Crystallographic Meeting (2025).
- [10] S. Cunha, R. M. Bastos, P. O. de Silva, G. A. Nobre Costa, I. Vencato, C. Lariucci, H. B. Napolitano, C. M. A. de Oliveira, L. Kato, C.C. da Silva, D. Menezes, M. A. Vannier-Santos, *Monatsh. Chem.*, **138** (2007) 111.

WPLYW STECHIOMETRII REAKCJI NA WŁAŚCIWOŚCI STRUKTURALNE MIESZANEGO KOMPLEKSU KWASU WALPROINOWEGO Z 1,10-FENANTROLINĄ I MIEDZIĄ

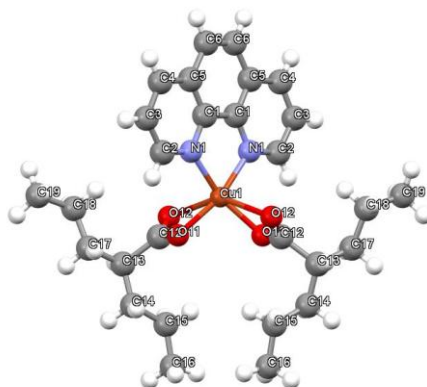
Emilia Bronikowska^{1,2}, Paulina Wiśniewska¹, Tadeusz Muzioł¹

¹ Faculty of Chemistry, Nicolaus Copernicus University in Toruń, Gagarina 7, 87-100 Toruń, Poland;

² Doctoral School of Exact and Natural Sciences, Nicolaus Copernicus University in Toruń, W. Bojarskiego 1, 87-100 Toruń, Poland

Kwas walproinowy (VPA), znany również jako kwas 2-propylopentanowy, to krótkołańcuchowy, rozgałęziony kwas tłuszczowy. Jest to lek pierwszego rzutu w leczeniu padaczki, skuteczny zarówno w napadach uogólnionych, jak i częściowych. Jest również obiektem zainteresowania jako potencjalny lek w przebiegu zaburzeń afektywnych dwubiegunowych oraz w profilaktyce migrenowych bólów głowy. Stosowanie VPA wymaga jednak często wysokich dawek, co może prowadzić do poważnych skutków ubocznych, takich jak hepatotoksyczność czy teratogenność. W celu poprawienia biodostępności leku przy równoczesnym ograniczeniu podawanej pacjentowi dawki stosuje się połączenia kwasu walproinowego z m.in. metalami [1,2].

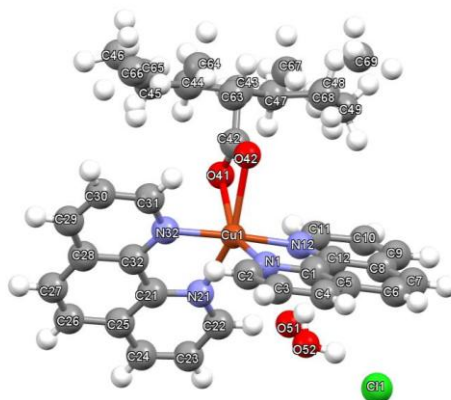
Jednym z testowanych w tym celu związków kompleksowych jest połączenie kwasu walproinowego (VPA) z 1,10-fenantroliną (phen) oraz miedzią [1]. W literaturze opisano właściwości takiego kompleksu, a jego struktura została wykorzystana przez nas jako znana struktura modelowa. Powtarzając wykonaną przez zespół badaczy syntezę udało nam się otrzymać monokryształy, które następnie poddaliśmy badaniom dyfrakcyjnym, co pozwoliło na otrzymanie niżej przedstawionej struktury.



Rys. 1. Związek kompleksowy [Cu(VPA)₂(phen)].

W kolejnych próbach sprawdzony został wpływ stechiometrii reakcji na otrzymywany produkt. Przy dwukrotnym zwiększeniu ilości 1,10-fenantroliny zaobserwowana została zmiana w sferze koordynacyjnej, a otrzymana struktura została pokazana na rysunku poniżej. Dla innych stechiometrii nie zaobserwowano zmian strukturalnych.

B-53



Rys. 2. Związek kompleksowy $[\text{Cu}(\text{VPA})(\text{phen})_2]\text{Cl}$.

Zmiana w wewnętrznej sferze koordynacyjnej wpłynęła na ładunek układu, co spowodowało pojawienie się atomu chloru w zewnętrznej sferze. Miało to również wpływ na upakowanie przestrzenne kryształu oraz zmianę grupy przestrzennej $C2/c$ dla $[\text{Cu}(\text{VPA})_2(\text{phen})]$ i $Pccn$ dla $[\text{Cu}(\text{VPA})(\text{phen})_2]\text{Cl}$.

Literatura

- [1] M. Sylla-Iyarreta Veitia, *Biochimie*, **91** (2009) 1286–1293.
- [2] P. R. dos Santos, *Polyhedron*, **90** (2015) 239–244.

FORMY KRystaliczne AMRINONU: MIĘDZY PRZEWIDYWANIEM A RZECZYWISTOŚCIĄ

Bartłomiej Bożek, Agnieszka Skórska-Stania

*Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej, Uniwersytet Jagielloński
Wydział Chemii ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków*

W niniejszej pracy podjęto próbę zaprojektowania nowych form krystalicznych leku nasercowego – amrinonu [1] – z wykorzystaniem podejścia inżynierii krystalicznej ukierunkowanego na modulację oddziaływań międzycząsteczkowych. Pomimo udokumentowanej aktywności farmakologicznej [2], ograniczona rozpuszczalność oraz profil działań niepożądanych tego związku [3] wskazują na potrzebę poszukiwania alternatywnych form stałych.

Strategia badawcza oparta została na racjonalnym doborze koformerów kwasowych (kwas benzoesowy oraz kwas salicylowy), uwzględniającym zarówno komplementarność motywów supramolekularnych, jak i relacje wartości pKa. Zastosowane podejście doprowadziło do uzyskania nowych faz krystalicznych o zróżnicowanej organizacji strukturalnej, ujawniających konkurujące scenariusze asocjacji w układach wieloskładnikowych.

Analiza strukturalna przeprowadzona metodą dyfrakcji rentgenowskiej na monokryształach pozwoliła na identyfikację dominujących synthonów supramolekularnych oraz ocenę ich roli w stabilizacji sieci krystalicznej. Otrzymane wyniki wskazują, że nawet pozornie proste układy kwas–zasada mogą prowadzić do nieoczywistych rozwiązań strukturalnych, częściowo odbiegających od klasycznych przewidywań opartych na analizie ΔpK_a .

Przedstawione badania podkreślają potencjał inżynierii krystalicznej jako narzędzia do projektowania nowych form farmaceutycznych, jednocześnie uwidaczniając ograniczenia aktualnych podejść predykcyjnych w przypadku złożonych układów supramolekularnych.

Literatura

- [1] A. Wojtczak, J.R. Luft, V. Cody, Structural aspects of inotropic bipyridine binding. Crystal structure determination to 1.9 Å of the human serum transthyretin-milrinone complex., *Journal of Biological Chemistry*, **268**(9) (1993) 6202–6206, ISSN 0021-9258. [https://doi.org/10.1016/S0021-9258\(18\)53239-7](https://doi.org/10.1016/S0021-9258(18)53239-7)
- [2] Celik, S., Akyuz, S., Ozel, A. E. *et al.* Vibrational Spectroscopic and Molecular Docking Studies of Amrinone, a Cardiotonic Inotropic Drug. *Opt. Spectrosc.*, **131** (2023) 489–503. <https://doi.org/10.1134/S0030400X2305003X>
- [3] A. Zejc, M. Gorczyca, *Chemia leków*, (2008) 360–361.

WPLYW ANIONU AZOTANOWEGO(V) I AZYDKOWEGO NA STRUKTURY KOMPLEKSÓW Z POCHODNĄ LIGANDA TERPIRYDYNY

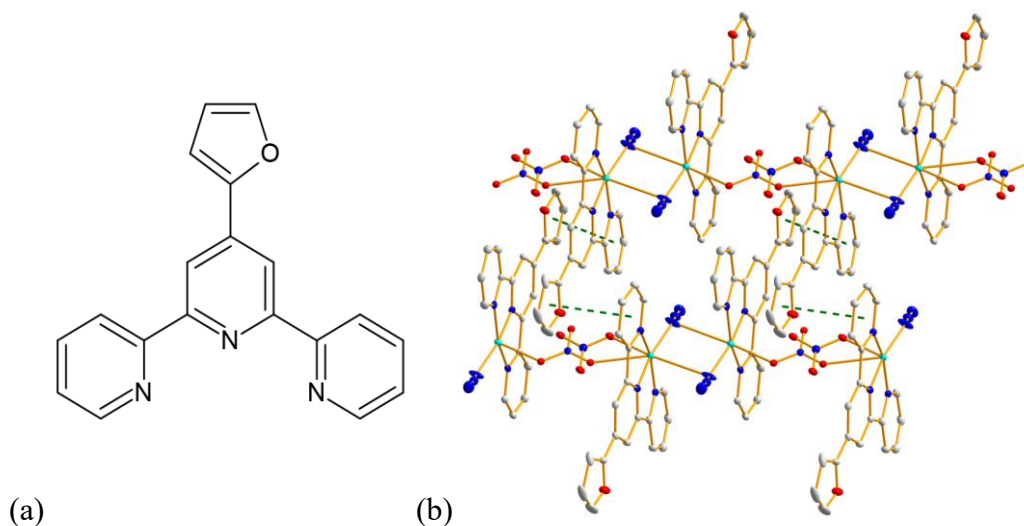
Weronika Bogdał^{1,2}, Anna Jurowska¹, Maciej Hodorowicz¹, Janusz Szklarzewicz¹

¹ *Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków*

² *Uniwersytet Jagielloński, Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, ul. Prof. St. Łojasiewicza 11, 30-348 Kraków*

Grupą związków doskonałą do wykorzystania jako ligandy w syntezie związków kompleksowych, jest terpirydyna oraz jej pochodne. Związki te posiadają kilka potencjalnych miejsc koordynacyjnych, dzięki czemu są ligandami polidonorowymi, które pozwalają na zablokowanie miejsc koordynacyjnych atomu metalu, a tym samym kontrolowanie wymiarowości sieci przestrzennej. Dodatkowo posiadają pierścienie aromatyczne umożliwiające powstawanie oddziaływań π - π , NO- π oraz N- π , stabilizujących tworzone struktury. Możliwych jest wiele modyfikacji terpirydyny, co sprawia, że jest to bardzo szeroka i mało zbadana grupa ligandów. Obecne w literaturze związki tego typu prezentują ciekawe formy strukturalne oraz wykazują właściwości magnetyczne, katalityczne i biologiczne [1,2]. Dzięki czemu, mogą być stosowane, na przykład jako magnesy molekularne oraz w leczeniu nowotworów [3,4].

W naszych badaniach wykorzystaliśmy pochodną terpirydyny z dodatkowym pierścieniem furanowym (ftpy, Rys. 1a). Jedną z powstałych struktur przedstawiono na Rysunku 1b.



Rys. 1. (a) Pochodna liganda terpirydyny (ftpy), (b) jeden z otrzymanych związków kompleksowych miedzi(II) z ligandem ftpy oraz mostkami azydowymi typu „end-on” i mostkami azotanowymi(V). Zieloną przerywaną linią zaznaczono oddziaływania typu π - π między pierścieniami aromatycznymi ligandów ftpy. Atomy wodoru pominięto dla klarowności rysunku.

Przeprowadzone badania wskazują na powstawanie różnych struktur dla kompleksów mających jako przeciwjon anion azydkowy lub anion azotanowy(V). Znaczący wpływ na powstające struktury ma również użyty jon metalu.

B-55

Zaobserwowano zmiany w ilości skoordynowanych ligandów terpirydyny oraz ilości i typie połączeń mostkujących między atomami metali. W otrzymanych strukturach obecne są zarówno mostki azotanowe(V), jaki i mostki azydkowe typu „end-on” (μ -1,1) oraz „end-to-end” (μ -1,3), a także aniony w formie ligandów terminalnych lub nieskoordynowanych przeciwjonów [5].

Związki otrzymane w postaci monokryształów zostały zbadane metodami rentgenografii strukturalnej, a na podstawie otrzymanych danych dyfrakcyjnych zostały wyznaczone ich struktury. Skład i jednorodność związków potwierdzono za pomocą analizy elementarnej i spektroskopii IR. Właściwości fizykochemiczne otrzymanych związków kompleksowych zbadano z użyciem metod spektroskopowych, voltamperometrycznych oraz pomiarów magnetycznych.

Literatura

- [1] Z. Naseri, A. N. Kharat, A. Banavand, A. Bakhoda, S. Foroutannejad, *Polyhedron*, **33** (2012) 396.
- [2] O. Kahn, S. Sikorav, J. Gouteron, S. Jeannin, Y. Jeannin, *Inorg. Chem.*, **22** (1983) 2877.
- [3] J. E. Beves, E. C. Constable, S. Decurtins, E. L. Dunphy, C. E. Housecroft, T. D. Keene, M. Neuburger, S. Schaffner, J. A. Zampese, *CrystEngComm*, **11** (2009) 2406.
- [4] G. Lowe, A. S. Droz, T. Vilaiwan, G. W. Weaver, J. J. Park, J. M. Pratt, L. Tweedale, L. R. Kelland, *J. Med. Chem.*, **42** (1999) 3167.
- [5] W. Bogdał, A. Jurowska, M. Hodorowicz, J. Szklarzewicz, E. Doustkhah, E. Zangrando, O. F. Tutar, G. Mahmoudi, *Inorg. Chem. Commun.*, **176** (2025) 114230.

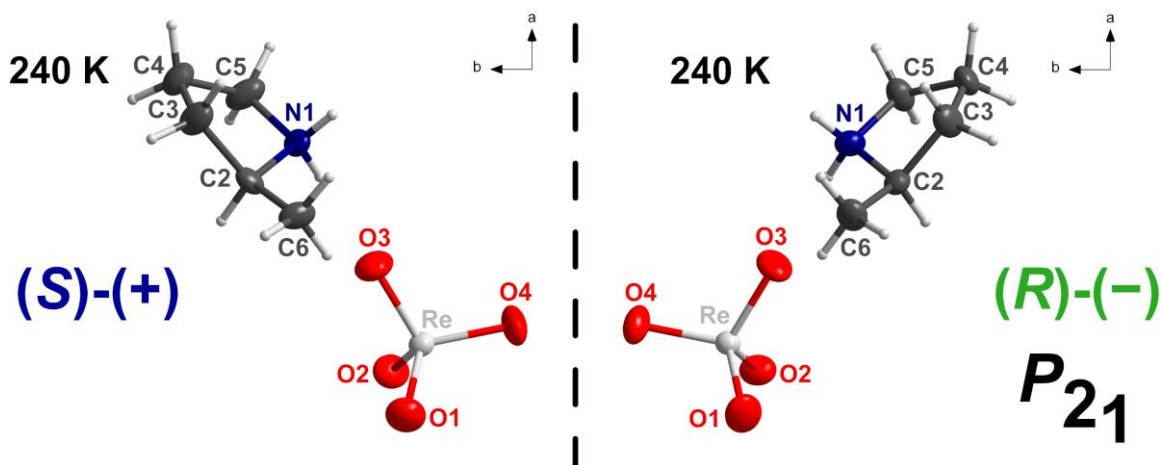
ENACJOMERYCZNE KRYSZTAŁY PLASTYCZNE AReO_4 Z CHIRALNYM KATIONEM 2-METYLOPIROLIDYNIOWYM

Hanna Bednarczyk, Marcin Moskwa

Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

Kryształy plastyczne stanowią fazę pośrednią między kryształem a cieczą. Charakteryzują się zachowaniem uporządkowania dalekiego zasięgu sieci krystalicznej przy jednoczesnej swobodnej rotacji tworzących ją cząsteczek lub jonów [1]. Układy te wykazują niską entropią topnienia oraz występowaniem przejść fazowych ciało stałe–ciało stałe o wysokiej entropii, związanych z aktywacją rotacyjnych stopni swobody [2]. Dzięki swoim unikalnym właściwościom znajdują zastosowanie m.in. jako stałe elektrolity, materiały ferroiczne oraz w optyce nieliniowej [1].

Przedstawiona zostanie charakterystyka strukturalna oraz właściwości fizykochemiczne dwóch enancjomerycznych kryształów plastycznych o ogólnym wzorze AReO_4 , gdzie podsieć anionową tworzą tetraedryczne aniony nadrenianowe $[\text{ReO}_4]^-$, a w lukach sieciowych umieszczone są chiralne kationy organiczne: (*S*)- lub (*R*)-2-metylopirolidyniowe. Na podstawie badań kalorymetrycznych (DSC) oraz termogravimetrycznych (TGA/DTA) określono stabilność termiczną badanych układów oraz zinterpretowano termodynamikę zachodzących w nich przejść fazowych.



Rys. 1. Niezależna część komórki elementarnej struktury krystalicznej nadrenianu (*S*)- oraz (*R*)-2-metylopirolidyniowego w temperaturze 240 K. Elipsoidy drgań termicznych narysowano z 50 % prawdopodobieństwem.

Literatura

- [1] J. M. Pringle, P. C. Howlett, D. R. MacFarlane, M. Forsyth, *J. Mater. Chem.*, **20** (2010) 2056–2062.
[2] J. Timmermans, *J. Phys. Chem. Solids*, **18** (1961) 1–8.

CRYSTALLOGRAPHIC STUDY OF 5-(CHLORO-BENZYLIDENE)RHODANINE-3-ACETIC ACIDS AND THEIR SALTS

Ewa Żesławska¹, Wojciech Nitek², Jadwiga Handzlik³, Waldemar Tejchman¹

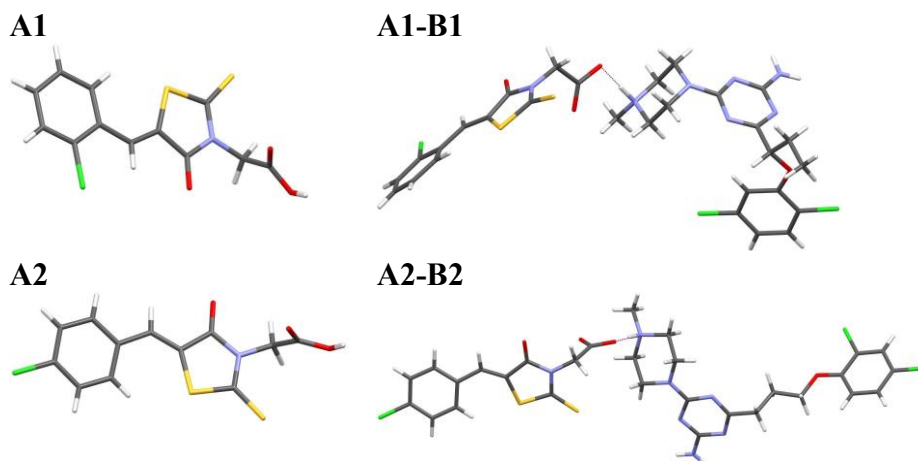
¹ *Institute of Biology and Earth Sciences, University of the National Education
Commission, Krakow, Podchorążych 2, 30-084 Kraków*

² *Faculty of Chemistry, Jagiellonian University, Gronostajowa 2, 30-387 Kraków*

³ *Chair of Chemical Technology and Biotechnology of Drugs, Jagiellonian University,
Medical College, Medyczna 9, 30-688 Kraków*

The family of rhodanine derivatives are under great interest of medicinal chemistry as the usefully scaffolds in the search of new drugs. 5-Arylidenerhodanine derivatives show interesting biological properties *e.g.* antimicrobial, antiviral, anticancer, antiinflammatory [1]. In our previous research [2], we have obtained 5-chlorobenzylidene-3-carboxyalkylrhodanine derivatives showing promising antibacterial activity. At present, our interest is focused on preparation of the salts for these acids.

In order to investigate structural properties of the selected synthesized compounds with antibacterial activity, we have determined the crystal structures of 5-(2'-chlorobenzylidene)rhodanine-3-acetic acid (**A1**) and 5-(4'-chlorobenzylidene)rhodanine-3-acetic acid (**A2**). We have also prepared and determined crystal structures of two salts with 1,3,5-triazine derivatives [3], namely the salt of **A1** with 4-[1-(2,5-dichlorophenoxy)propyl]-6-(4-methylpiperazin-1-yl)-1,3,5-triazin-2-amine (**B1**) and **A2** with 4-[3-(2,4-dichlorophenoxy)propyl]-6-(4-methylpiperazin-1-yl)-1,3,5-triazin-2-amine (**B2**).



We have analyzed the preferred geometry of the acids and corresponding anions present in the salts. Both salts possess the protonated nitrogen atom of piperazine ring which is engaged in hydrogen bond of carboxylate anion.

B-57

Literature

- [1] D. Kaminsky, A. Kryshchyn, R. Lesyk, *Eur. J. Med. Chem.*, **140** (2017) 542.
- [2] W. Tejchman, I. Korona-Głowniak, L. Kwietniewski, et al., *Saudi Pharm. J.*, **28** (2020) 414.
- [3] S. Sudoł. K. Kucwaj-Brysz, R. Kurczab, et al., *Eur. J. Med. Chem.*, **203** (2020) 112529.

BADANIA STRUKTURALNE I SORPCYJNE SOLI SREBRA(I) Z 1-(4-BROMOFENYLO)-N-(4H-1,2,4-TRIAZOL-4-YL)METANIMINĄ

Agata Bialońska, Martyna Barut

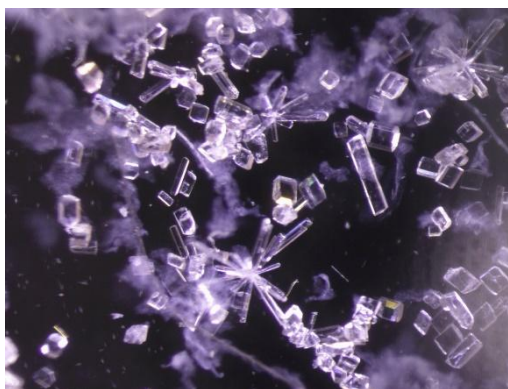
Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

1,2,4-triazole, dzięki ułożeniu trzech atomów azotu w pięcioczłonowym pierścieniu, posiadają możliwość łączenia jonów metali przejściowych za pomocą mostków. Dodatkowo, zależnie od wykorzystanych atomów azotu geometria powstałego mostku będzie różna. Szczególnym zainteresowaniem cieszą się właśnie wielordzeniowe związki koordynacyjne, które można w ten sposób uzyskać [1]. Wiele takich związków zostało opisanych w literaturze naukowej [2,3].

W wyniku reakcji nadchloranu srebra(I) z 1-(4-bromofenylo)-N-(4H-1,2,4-triazol-4-yl)metaniminą (4-BrPhatrz) otrzymano dwurdzeniowy związek krystaliczny (Rys. 1), w którym dwa kationy srebra(I) połączone są za pomocą mostków N1,N2 dwóch ligandów 4-BrPhatrz mostkujących. Strefę koordynacyjną srebra(I) uzupełnia także atom azotu pochodzący od liganda skoordynowanego terminalnie. Otrzymany związek ma charakterystyczny kształt litery „X”. Pozwala to na powstanie wewnątrz struktury jednowymiarowych kanałów wypełnionych anionami nadchloranowymi oraz cząsteczkami rozpuszczalnika. Przeprowadzone badania sorpcyjne wykazały możliwość przeprowadzenia wymiany rozpuszczalnika w kanałach.

Podobne związki o właściwościach sorpcyjnych szeroko opisane w literaturze zostały otrzymane przez reakcję soli miedzi(I) z 1-(4-X-fenylo)-N-(4H-1,2,4-triazol-4-yl)metaniminą (X=Br lub Cl) [4, 5].

Na plakacie zostaną przedstawione struktura krystaliczna otrzymanego związku oraz zmiany zachodzące w niej po wymianie rozpuszczalnika.



Rys. 1. Zdjęcie otrzymanych kryształów.

Literatura

- [1] J. G. Haasnoot, *Coord. Chem. Rev.*, **200–202** (2000) 131.
- [2] Y. Wang et al., *Inorg. Chem.*, **46** (2007) 2002.
- [3] Z. Bouhidel et al., *Inorganica Chimica Acta*, **482** (2018) 34–47
- [4] A. Bialońska, K. Drabent, B. Filipowicz, M. Siczek, *CrystEngComm.*, **15** (2013) 9859.
- [5] E. Ganczar, A. Bialońska, *Acta Cryst. B*, **79** (2023) 392.

MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDIES OF A HOMOLOGOUS SERIES OF PYRIDOXINE AND DICARBOXYLIC ACID SYSTEMS: FROM PIMELIC TO SEBACIC ACIDS

Milena Rożewska¹, Mateusz Goldyn^{1,2}, Anna Komasa¹, Mateusz Wiśniewski¹,
Elżbieta Bartoszak-Adamska^{*1}

¹ Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Uniwersytetu Poznańskiego 8,
61-614 Poznań

² Center for Advanced Technologies, Adam Mickiewicz University, Uniwersytetu
Poznańskiego 10, 61-614, Poznań

*e-mail: elzbieta.bartoszak-adamska@amu.edu.pl

The formation of multicomponent crystal systems, including salts and cocrystals, remains an important strategy for designing bioactive compounds with tailored physicochemical and functional properties. Systematic studies of structurally related cofomers enable the identification of general trends governing intermolecular interactions and crystal packing. In our previous work, we investigated complexes of pyridoxine (PN, vitamin B₆) with a series of short-chain aliphatic dicarboxylic acids, ranging from oxalic acid to adipic acid [1]. These systems were characterized by diverse stoichiometries (1:1, 2:1, and mixed compositions) and a variety of supramolecular synthons involving protonated pyridinium cations as well as carboxylate and carboxylic acid groups. A complex network of intra- and intermolecular hydrogen bonds plays a significant role in the organization of molecules within the crystal lattice.

To further investigate the effect of chain length on the structure of these complexes, the study was extended to longer aliphatic dicarboxylic acids: pimelic (PIM), suberic (SUB), azelaic (AZ), and sebacic (SEB) acids (Fig. 1). The increased chain length and conformational flexibility of these acids are expected to influence the hydrogen-bonding patterns and supramolecular organization of the resulting crystal systems. The aim of this work was to investigate the structural properties of pyridoxine complexes with higher homologues of aliphatic dicarboxylic acids (C₇–C₁₀). Particular attention was devoted to the influence of the aliphatic chain length on crystal packing and hydrogen-bonding networks.

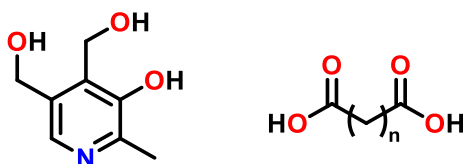


Fig. 1. Structures of pyridoxine (left) and the linear aliphatic dicarboxylic acids as cofomers (right): pimelic acid (n = 5), suberic acid (n = 6), azelaic acid (n = 7) and sebacic acid (n = 8).

Mechanochemical grinding using a ball mill was also explored for the synthesis of the investigated systems. Particular attention was paid to the selection of an appropriate stoichiometric ratio between pyridoxine and the acidic component,

B-59

as well as to the grinding conditions (neat grinding or liquid-assisted grinding using a selected solvent). Powder X-ray diffraction (PXRD) not only confirmed the formation of new crystalline phases but also proved essential for optimizing grinding conditions.

Solution crystallization and mechanochemical experiments led to the three new multicomponent pyridoxine systems: the PN·PIM 1:1 salt, the PN·SEB 2:1 salt, and the PN·SUB·H₂O 1:1:1 salt hydrate. The structures of these systems were determined by single-crystal X-ray diffraction (Fig. 2). To date, attempts to cocrystallize pyridoxine with azelaic acid by solution cocrystallization or by grinding have been unsuccessful.

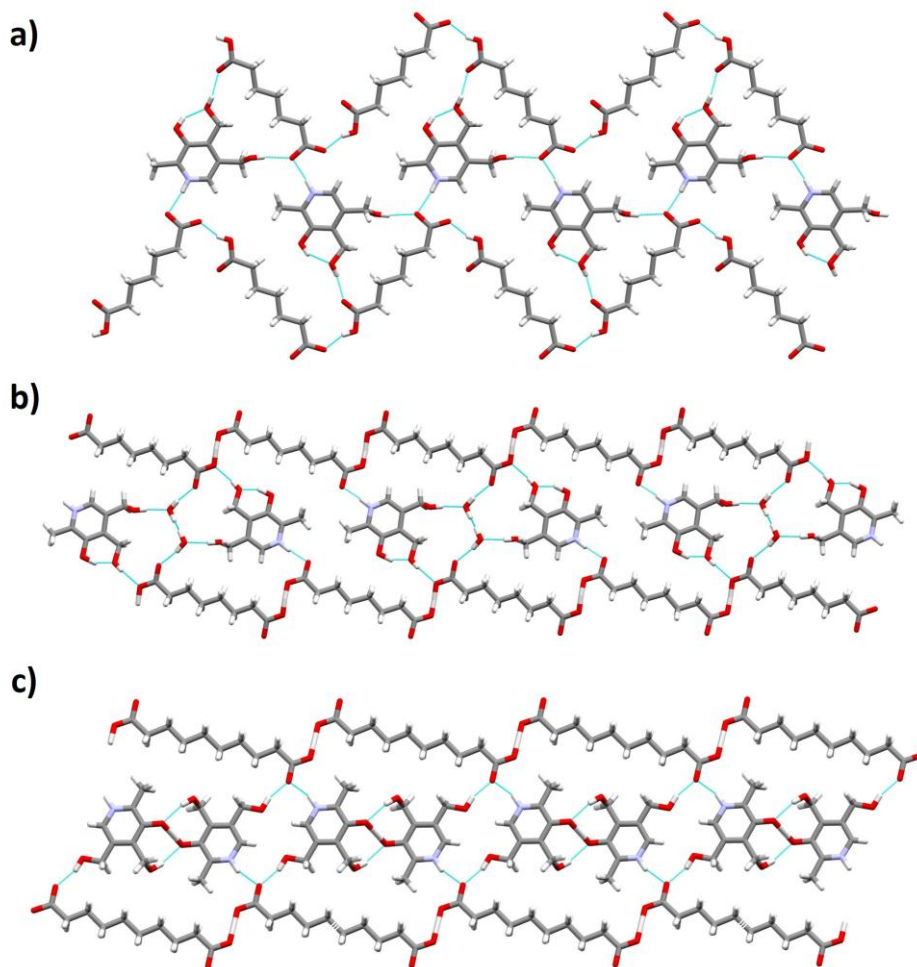


Fig. 2. Crystal structures of PN·PIM 1:1 salt (a), PN·SUB·H₂O 1:1:1 salt hydrate (b), and PN·SEB 2:1 salt (c).

Acknowledgements

MG thanks the National Science Centre (grant PRELUDIUM no. 2021/41/N/ST5/00503) for financial support.

Literature

- [1] A. Komasa, Z. Dega-Szafran, K. Babijczuk, M. Gołdyn, E. Bartoszak-Adamska, W. Pielach, D. Larowska-Zarych, A. Sip, Salts of vitamin B₆ with aliphatic dicarboxylic acids. Experimental and theoretical research, *J. Mol. Struct.*, **1357** (2026) 144868.

Zn(II) COORDINATION POLYMER BASED ON A SALICYLHYDRAZONE LIGAND: CRYSTAL STRUCTURE AND HIRSHFELD SURFACE ANALYSIS

Maja Mielcarz^{1,2}, Neda Heydari³, Rahman Bikas³, Anna Kozakiewicz-Piekarz¹

¹ *Department of Biomedical and Polymer Chemistry, Faculty of Chemistry, Nicolaus Copernicus University in Torun, 87-100 Toruń, Poland*

² *Doctoral School of Exact and Natural Sciences, Nicolaus Copernicus University in Toruń, 87-100 Toruń, Poland*

³ *Department of Chemistry, Faculty of Science, Imam Khomeini International University, 34148-96818, Qazvin, Iran*

Hydrazone-based Schiff bases constitute an important class of ligands in coordination chemistry due to their structural flexibility, diverse coordination modes, and potential biological activity. In particular, their ability to form stable complexes with metal ions makes them attractive candidates for the design of functional materials with enhanced physicochemical and bioactive properties [1,2]. This work presents the synthesis, structural characterization, and Hirshfeld surface analysis of a hydrazone-Schiff base ligand (H₃L) and its Zn(II) coordination polymer. The ligand was obtained from the reaction of salicylhydrazide and dehydroacetic acid and represents a flexible ONO-donor system capable of stabilizing metal ions in various coordination environments [3]. The reaction of H₃L with Zn(OAc)₂·2H₂O in methanol led to the formation of a 1D coordination polymer, [Zn(μ-HL)(CH₃OH)]_n. Both the ligand and the complex were characterized by spectroscopic methods and single-crystal X-ray diffraction, confirming successful coordination to the Zn(II) center. Crystal structure analysis revealed that H₃L crystallizes in the monoclinic system (*P*2₁/*c*) and adopts the amidic form stabilized by intra- and intermolecular hydrogen bonding interactions as well as π···π stacking (Figure 1). The Zn(II) coordination polymer also crystallizes in the *P*2₁/*c* space group and exhibits a distorted octahedral geometry around the metal center. The ligand acts as a binegative (HL²⁻) chelating and bridging unit, coordinating through ONO donor atoms and forming a 1D polymeric chain (Figure 1). This coordination mode results in an extended structure in which the ligand links multiple Zn(II) centers. The changes in the structural features of the hydrazone ligand upon coordination to the metal core were investigated in detail, and the results showed that the bond lengths of the coordinating atoms of the hydrazone moiety change significantly upon coordination to the Zn(II) core. The Hirshfeld surface analysis was performed using the *CrystalExplorer21* program to investigate non-covalent interactions within the structures of the ligand and coordination polymer using *d*_{norm}, shape index, and curvedness surface maps. The *d*_{norm} surface has three colored regions (red, white, and blue) that represent different levels of electron density in the crystal structure. Red indicates regions of high electron density (close proximity of atoms), white indicates medium electron density (medium proximity), and blue indicates regions of low electron density in atoms. The *d*_{norm} surface map of H₃L is illustrated in Figure 2a, which shows C–H···O interactions in the structure. According to the *d*_{norm} surface map of [Zn(μ-HL)(CH₃OH)]_n (Figure 3a), the observed red spots are related to O–H···O, N–H···O, and Zn···O interactions. In the shape index surface of H₃L and [Zn(μ-

B-60

HL)(CH₃OH)]_n (Figures 2b and 3b), the orange and blue butterfly-shaped triangles on the aromatic ring in the structures of H₃L and [Zn(μ-HL)(CH₃OH)]_n confirm the presence of π···π stacking interactions. Moreover, the existence of orange (hollow) regions on the aromatic ring in the structure of [Zn(μ-HL)(CH₃OH)]_n confirms the presence of C–H···π interactions. According to the curved surface of H₃L (Figure 2c) and [Zn(μ-HL)(CH₃OH)]_n (Figure 3c), the existence of flat areas on the aromatic rings confirms the presence of π···π stacking and C–H···π interactions in these structures.

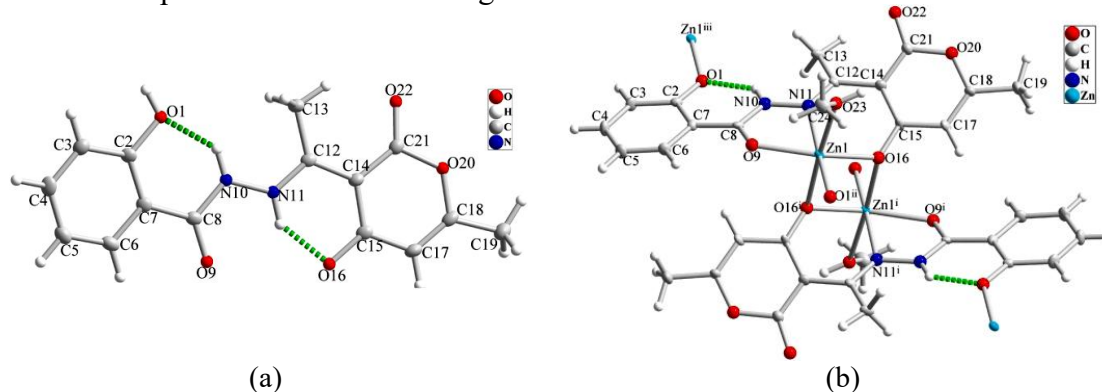


Fig. 1. (a) Molecular structure of H₃L, with thermal ellipsoids drawn at the 50% probability level; the green dashed line shows an intramolecular N–H···O hydrogen bond. (b) Molecular structure of [Zn(μ-HL)(CH₃OH)]_n with thermal ellipsoids drawn at the 50% probability level.

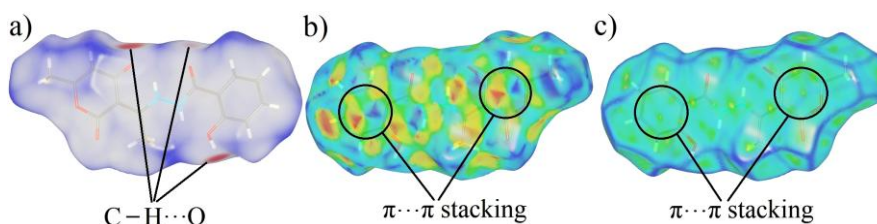


Fig. 2. Hirshfeld surface analysis of H₃L: (a) d_{norm} , (b) shape index, and (c) curvedness.

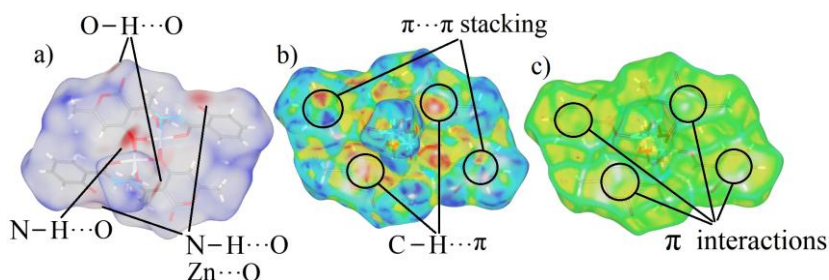


Fig. 3. Hirshfeld surface analysis of [Zn(μ-HL)(CH₃OH)]: (a) d_{norm} , (b) shape index, and (c) curvedness.

These results demonstrate that salicylhydrazone ligands exhibit flexible coordination behavior and have a high potential to form coordination polymers with transition-metal ions such as Zn(II). The bond lengths of the coordinating atoms of the hydrazone ligands can change during and after their coordination to a metal core.

Literature

- [1] D. A. Tafere et al., *RSC Adv.*, **15** (2025) 6191.
- [2] D. P. Fairlie et al., *Inorg. Chem.*, **33** (1994) 6425.
- [3] M. Banaei-Mohammadi et al., *J. Mol. Struct.*, **1365** (2026) 145963.

LISTA ZAREJESTROWANYCH UCZESTNIKÓW KONWERSATORIUM LIST OF THE REGISTERED PARTICIPANTS

Piotr Józef	Bardziński	Dr inż.	Politechnika Wrocławska
Giovanna	Barrionuevo Martins	PhD Student	Newcastle University, UK
Elżbieta	Bartoszak- Adamska	Dr hab.	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Martyna	Barut	Lic.	Uniwersytet Wrocławski
Shiva	Batmanghelich	Mgr	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Tamara	Bednarchuk	Dr	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Hanna	Bednarczyk	student	Uniwersytet Wrocławski
Anna	Ben	Mgr	Uniwersytet Łódzki
Agata	Białońska	Dr hab.	Uniwersytet Wrocławski
Katarzyna	Biniek-Antosiak	Dr	Instytut Chemii Bioorganicznej PAN w Poznaniu
Jaroslaw	Błaszczak	Mgr inż.	Rigaku
Weronika	Bogdał	Mgr	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Bartłomiej Rafał	Bożek	Lic.	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Emilia	Bronikowska	Mgr	Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
Iwona	Bryndal	Dr	Uniwersytet Medyczny im. Piastów Śląskich we Wrocławiu
Marta	Brzezińska	Mgr inż.	Politechnika Wrocławska
Ireneusz	Buganski	Dr	Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Anna	Bujacz	Dr hab.	Politechnika Łódzka
Grzegorz	Bujacz	Prof. dr hab.	Politechnika Łódzka
Karolina	Bukała	Mgr	Uniwersytet Wrocławski
Helena Lidia	Butkiewicz	Dr inż.	Politechnika Warszawska
Lilianna	Chęcińska	Dr hab.	Uniwersytet Łódzki
Patrycja	Chmielewska	Mgr	Narodowy Instytut Leków
Jarosław	Chojnacki	Prof. dr hab.	Politechnika Gdańska
Arkadiusz	Ciesielski	Dr	Uniwersytet Warszawski
Łukasz	Cieszyński	Lic.	Uniwersytet Warszawski
Jerzy	Czachórski	Mgr	Malvern Panalytical

Michał	Czaja	Mgr	Labsoft Sp. z o.o.
Patryk	Czapnik	Mgr	Uniwersytet Łódzki
Filip	Ćwięka	-	I Liceum Ogólnokształcące z Oddziałami Dwujęzycznymi im. Mikołaja Kopernika w Krośnie
Marek	Daszkiewicz	Dr hab.	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Aleksandra	Deptuch	Dr	Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN w Krakowie
Alena	Dolińska	Lic.	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Dawid	Drozdowski	Dr	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Krzysztof	Dubert	Lic.	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Dominik	Duch	-	Uniwersytet Warszawski
Michał	Duda	Dr	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Kamil Filip	Dziubek	Dr	Universität Wien
Krzysztof	Ejsmont	Dr hab.	Uniwersytet Opolski
Taiyebun	Fabiha	Mgr inż.	Politechnika Wrocławska
Katarzyna	Flor	Inż.	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
CHRIS HEBERT	FRANCO	Dr	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Michał	Gacki	Dr	Politechnika Łódzka
Zuzanna	Gackowska	-	Politechnika Warszawska
Emilia	Ganczar	Dr	Uniwersytet Wrocławski
Aleksandra	Gawin	brak	I Liceum Ogólnokształcące im. Lotników Polskich w Oleśnie
Anna	Gągor	Dr hab.	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Mirosław	Gilski	Dr hab.	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Marek	Gnypek	nie dotyczy	SCANMAT Sp. z o.o.
Mateusz	Gołdyn	Dr	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Evgeny	Goreshnik	Dr	Jożef Stefan Institute
Szymon	Grabowski	Dr	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Paweł	Grzymiski-Ostrega	Lic.	Uniwersytet Warszawski

Andrzej	Gzella	Prof. dr hab.	Uniwersytet Medyczny im. Karola Marcinkowskiego w Poznaniu
Zofia	Hajdaczuk	Lic.	Uniwersytet Wrocławski
Katarzyna	Helios	Dr inż.	Politechnika Wrocławska
Felix	Hennersdorf	Dr	Rigaku
Maciej	Hodorowicz	Dr hab.	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Monika	Hryniuk	Lic.	Uniwersytet Wrocławski
Valeryia	Hushcha	Mgr	Uniwersytet Łódzki
Sepideh	Jafari	Mgr	Politechnika Łódzka
Piotr	Jakięła	Mgr	Malvern Panalytical
Jan	Janczak	Prof. dr hab.	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Agnieszka Magdalena	Janiak	Dr hab.	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Mariusz	Jaskólski	Prof. dr hab.	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Jagoda Hanna	Jerzy	Inż.	Uniwersytet Przyrodniczy w Poznaniu
Aneta	Jezierska	Dr hab.	Uniwersytet Wrocławski
Mateusz	Jóźwiak	student	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Nadia	Kaczorowska	student studiów licencjackich	Uniwersytet Wrocławski
Julia	Kamińska	Mgr inż.	Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN w Łodzi
Daniel	Kamiński	Dr hab.	Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie
Julia	Kamysz	student	Uniwersytet Warszawski
Zbigniew	Karczmarzyk	Dr hab.	Uniwersytet w Siedlcach
Zbigniew	Kaszukur	Prof. dr hab.	Instytut Chemii Fizycznej PAN w Warszawie
Oskar	Kaszubowski	Mgr	Uniwersytet Wrocławski
Andrzej	Katrusiak	Prof. dr hab.	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Michał	Kaźmierczak	Dr	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Fareeha Anwar	Khan	Mgr inż.	Politechnika Wrocławska
Paulina	Kielian	Lic.	Uniwersytet Wrocławski
Vasyl	Kinzhybalo	Dr	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Andrzej	Kochel	Dr hab.	Uniwersytet Wrocławski

Karol	Kopeć	Inż.	Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Oleksandr	Korolevych	Dr	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Zuzanna	Kotlińska	Student	Politechnika Wrocławska
Adrian Krzysztof	Kowaliński	Mgr inż.	Politechnika Wrocławska
Dorota	Kowalska	Dr	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Andrzej	Kowalski	Dr	Rigaku
Patryk	Kowalski	Inż.	Politechnika Łódzka
Anna	Kozakiewicz-Piekarz	Dr	Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
Anna	Kozioł	Prof. dr hab.	Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie
Dorota	Krasowska	Dr	Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN w Łodzi
Marta	Krause	Inż.	Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Jacek	Krawczyk	Dr hab.	Uniwersytet Śląski w Katowicach
Marta S.	Krawczyk	Dr	Uniwersytet Medyczny im. Piastów Śląskich we Wrocławiu
Monika K.	Krawczyk	Dr	Uniwersytet Wrocławski
Antoni	Krawiec	student	Uniwersytet Opolski
Kamil	Krzemiński	Inż.	Politechnika Warszawska
Szymon	Krzywda	Dr hab.	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Maria	Książek	Dr	Uniwersytet Śląski w Katowicach
Olga	Książkiewicz-Kołucka	Mgr	Uniwersytet Łódzki
Maciej	Kubicki	Prof. dr hab.	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Zuzanna	Kurek	Inż.	Politechnika Łódzka
Anna	Kwiecień	Dr	Uniwersytet Medyczny im. Piastów Śląskich we Wrocławiu
Marek Paweł	Liedtke	student	Uniwersytet Wrocławski
Huang	Lin	nd.	LANScientific
Tadeusz	Lis	Prof. dr hab.	Uniwersytet Wrocławski
Rafał	Łabudek	Mgr inż.	Rigaku
Sebastian	MACHOWSKI	Mgr	Testchem
Izabela	Madura	Prof. dr hab.	Politechnika Warszawska
Anna	Makal	Dr hab.	Uniwersytet Warszawski

Marcin Szymon	Malecki	Dr	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Maura	Malińska	Dr hab.	Uniwersytet Warszawski
Magdalena	Małecka	Dr hab.	Uniwersytet Łódzki
Michalina	Maszkowska	Brak, absolwent liceum	I Liceum Ogólnokształcące im. Bolesława Krzywoustego
Karolina	Matuszak	Mgr inż.	Politechnika Wrocławska
Anna	Michalik	Student	Uniwersytet Medyczny im. Piastów Śląskich we Wrocławiu
Maja	Mielcarz	Mgr	Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
Natalia	Mikłuszka	Lic.	Uniwersytet Wrocławski
Adam	Mizera	Dr	Instytut Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu
Anna	Mocarska	Mgr	Narodowy Instytut Leków
Maja	Morawiak	Dr	Instytut Chemii Organicznej PAN w Warszawie
Igor	Mossur	Student I stopnia	Politechnika Łódzka
Weronika	Mruszczyk	Lic.	Uniwersytet Łódzki
Hubert	Mulczyński	Brak	Politechnika Poznańska
Krzysztof	Muszyński	Inż.	Politechnika Łódzka
Igor	Naporowski	Inż.	Politechnika Łódzka
Daniel	Narh	Mgr inż.	Politechnika Wrocławska
Katarzyna	Niedośpiąt	Inż.	Politechnika Warszawska
Dominika	Nielipińska	Mgr inż.	Politechnika Łódzka
Maciej	Nielipiński	Mgr inż.	Politechnika Łódzka
Wojciech	Nitek	Dr	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Kajetan	Nocuń	Student	Politechnika Warszawska
Przemysław	Nowak	Mgr inż.	Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN w Łodzi
ELŻBIETA	NOWAK	Dr hab.	Międzynarodowy Instytut Biologii Molekularnej i Komórkowej w Warszawie
Maciej	Nowak	Dr	Uniwersytet Medyczny im. Piastów Śląskich we Wrocławiu
Andrzej	Nowok	Dr	Politechnika Wrocławska
Wiktoria	Objalska	W trakcie licencjatu	Uniwersytet Łódzki
Andrzej	Olczak	Dr hab.	Politechnika Łódzka
Paweł	Ołowek	Mgr	Rigaku
Marta	Orlikowska	Dr	Uniwersytet Gdański
Magdalena	Ostrycharz	Mgr inż.	Politechnika Łódzka
Kacper	Pacut	Lic.	Uniwersytet Śląski w Katowicach
Damian	Paliwoda	Dr	European Spallation Source ERIC
Kacper	Paszczyk	Lic.	Uniwersytet Warszawski

Ewa	Patyk-Kaźmierczak	Dr hab.	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Anna	Pietrzak	Dr	Politechnika Łódzka
Agnieszka	Pietrzyk-Brzezińska	Dr	Politechnika Łódzka
Patrycja	Piękoś	Mgr	Uniwersytet Wrocławski
Sebastian	Piskunov	Lic.	Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie
Paweł	Piszora	Dr hab.	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Tomasz Piotr	Posanow	student	Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Alicja	Prężyna	Lic.	Uniwersytet Warszawski
Kamila	Pruszkowska	Dr	Uniwersytet Warszawski
Anna	Pyra	Dr	Uniwersytet Wrocławski
Andrii	Pyrih	Dr	Uniwersytet Medyczny im. Karola Marcinkowskiego w Poznaniu
Jan	Pyrzanowski	Student	Politechnika Warszawska
Nadiia	Rebrova	Dr	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Piotr	Rejnhardt	Dr	Uniwersytet Warszawski
Tetiana	Romanova	Dr	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Kinga	Rozzak	Dr	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Magdalena	Rowińska	Mgr	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Magdalena	Ruczkowska	brak	XLI Liceum Ogólnokształcące im. Joachima Lelewela w Warszawie
Gracjan	Russ	student	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Magdalena	Ruszczak	Mgr	Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Chemii Przemysłowej im. Profesora Ignacego Mościckiego w Warszawie
Malwina	Rutkowska	Lic.	Uniwersytet Wrocławski
Aleksandra	Rydz	Studentka I stopnia	Uniwersytet Łódzki
Oskar	Rzepecki	brak	I Liceum Ogólnokształcące im. Bolesława Krzywoustego
Natalia	Sacharczuk	Mgr	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Marcin	Sadłowski	Mgr inż.	Malvern Panalytical

Anna	Sadocha	Mgr	Uniwersytet Warszawski
Jacek	Sawka	Mgr	Uniwersytet Wrocławski
Bartosz	Sekuła	Dr hab. inż.	Politechnika Łódzka
Svitlana	Shishkina	Dr	Institute of Organic Chemistry NAS of Ukraine
Wang	Shitai	nd.	LANScientific
Miłosz	Siczek	Dr	Uniwersytet Wrocławski
Tomasz	Sierański	Dr	Politechnika Łódzka
Artur	Sikorski	Dr hab.	Uniwersytet Gdański
Agnieszka	Skórska-Stania	Dr	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Yurii	Slyvka	Dr hab.	Ivan Franko National University of Lviv
Szymon	Sobczak	Dr	Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Paulina	Sobczak-Tyłuś	Mgr inż.	Sieć Badawcza Łukasiewicz- Łódzki Instytut Technologiczny
Klaudia	Stachowiak	Dr	Instytut Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu
Wojciech	Stawski	Dr	Ulm University
Monika Anna	Sternal	Mgr	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Amelia	Stężalska	student	Uniwersytet Wrocławski
Radosław	Strzałka	Dr	Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Oliwia	Strzechowska	w trakcie studiów	Politechnika Warszawska
Szymon	Sucheck	tytułu brak	Uniwersytet Warszawski
Małgorzata	Szczesio	Prof. dr hab.	Politechnika Łódzka
Ksenia	Szmigiel-Bakalarz	dr inż.	Uniwersytet Jana Długosza w Częstochowie
Zuzanna	Szypryt	Lic.	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Andrzej	Szytula	Prof. dr hab.	Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Katarzyna	Ślepokura	Dr hab.	Uniwersytet Wrocławski
Marcin	Świątkowski	Dr inż.	Politechnika Łódzka
Daniel Mariusz	Tchoń	Dr	Institute of Physics, Czech Academy of Sciences
Paweł E.	Tomaszewski	Dr hab.	Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN we Wrocławiu
Nadia	Trojanowska	Student	Uniwersytet Wrocławski
Agata	Trzęsowska-Kruszyńska	Dr hab.	Politechnika Łódzka
Kamil	Urbański	Mgr inż.	Anton Paar Poland
Dawid	Wachnicki	Student	Politechnika Wrocławska
Magdalena	Wietrzyńska	Inż.	Politechnika Wrocławska
Marcin	Właźlak	Mgr	Uniwersytet Łódzki

Martyna	Wojciechowska	Prof. dr hab.	Uniwersytet Wrocławski
Jakub	Wojciechowski	Dr	Rigaku
Andrzej	Wojtas	Dr	PROTO Manufacturing Europe
Wojciech	Wolf	Prof. dr hab.	Politechnika Łódzka
Januszq	Wolny	Prof. dr hab.	Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Krzysztof	Wozniak	Prof. dr hab.	Uniwersytet Warszawski
Sebastian	Wroński	Prof. dr hab.	Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Patryk	Wróbel	nie dotyczy	SCANMAT Sp. z o.o.
Zuzanna	Wylon	Inż.	Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Waldemar	Wysocki	Dr	Uniwersytet w Siedlcach
Roman	Yavetskiy	Prof. dr hab.	Institute for Single Crystals of NAS of Ukraine
Anna	Zep	Dr	Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Chemii Przemysłowej im. Profesora Ignacego Mościckiego w Warszawie
Marta	Zezula	Dr inż.	Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Chemii Przemysłowej im. Profesora Ignacego Mościckiego w Warszawie
Kacper	Zielak	Inż.	Politechnika Łódzka
Sylwia	Zięba	Dr	Instytut Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu
Marcin	Ziobro	Mgr	Uniwersytet Wrocławski
Maciej	Żak	Inż.	Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie
Andrzej	Żarczyński	Dr	Politechnika Łódzka
Ewa	Żesławska	Dr hab.	Uniwersytet Pedagogiczny w Krakowie

INDEKS AUTORÓW PRAC / INDEX OF AUTHORS

Czcionką pogrubioną zaznaczono autorów prezentujących, czcionką pochylą współautorów.

Presenting authors are shown in **bold font**, co-authors *in italics*.

<i>Agnieszka Adamczyk-Woźniak</i>	<i>A-48</i>
<i>Angelika Adamus-Grabicka</i>	<i>B-50</i>
<i>Witold Andrałojć</i>	<i>B-43</i>
<i>Stephen Armstrong</i>	<i>B-15</i>
<i>Paul D. Asimow</i>	<i>B-15</i>
<i>Anna Bajerowska</i>	<i>B-17</i>
<i>Ewa Bajerowska</i>	<i>B-17</i>
<i>Anton Balabanov</i>	<i>A-7</i>
<i>Adhara Baldassarre</i>	<i>R-3</i>
<i>Ewelina Baran</i>	<i>B-16</i>
<i>Daniel Baranowski</i>	<i>B-5</i>
Piotr Józef Bardziński	B-15
<i>Bolesław Barszcz</i>	<i>B-43</i>
<i>Paulina Bartos</i>	<i>B-10</i>
Elżbieta Bartoszak-Adamska	B-59
<i>Rafał Bartoszewicz</i>	<i>A-23</i>
Martyna Barut	B-58
Shiva Batmanghelich	B-14
<i>Vyacheslav Baumer</i>	<i>A-7</i>
Tamara Bednarchuk	A-15, A-16, A-35, M-2, M-14
Hanna Bednarczyk	B-56
<i>Anna Bednarowicz</i>	<i>B-7</i>
<i>Magdalena Bejger</i>	<i>B-5</i>
Anna Ben	A-58
<i>Pedro Berastegui</i>	<i>A-12</i>
<i>Enrico Berretti</i>	<i>R-3</i>
<i>Agata Białońska</i>	<i>B-42, B-58, M-3</i>
<i>Alina Bieńko</i>	<i>M-12</i>
<i>Rahman Bikas</i>	<i>B-33</i>
<i>Rahman Bikas</i>	<i>B-60</i>
<i>Roberto Bini</i>	<i>R-3</i>
Katarzyna Biniak-Antosiak	B-5
<i>Katarzyna Błazewska</i>	<i>A-3</i>
<i>Roman Boča</i>	<i>M-12</i>
Weronika Bogdał	B-55
<i>Joanna Bojarska</i>	<i>A-45</i>
<i>Azzedine Bousseksou</i>	<i>R-6</i>
Bartłomiej Rafał Bożek	B-54
<i>Alice Brink</i>	<i>M-1</i>

Emilia Bronikowska	B-53
Iwona Bryndal	B-52
Marta Brzezińska	B-6
<i>Elżbieta Budzisz</i>	B-50
Ireneusz Buganski	R-20, A-25, B-18
<i>Elena Buixaderas</i>	M-9
<i>Grzegorz Bujacz</i>	A-5
Anna Bujacz	A-5, B-4
<i>Helena Butkiewicz</i>	A-48, A-55
Andrew B. Cairns	R-3
Silvia C. Capelli	B-28
Matteo Ceppatelli	R-3
<i>Lilianna Chęcińska</i>	A-57, A-58
<i>Patrycja Chmielewska</i>	B-16
Arkadiusz Ciesielski	A-18, A-30, A-39
Łukasz Cieszyński	B-51
<i>Saioa Cobo</i>	R-6
<i>Michał K. Cyrański</i>	A-30, A-39
<i>Jerzy Czachórski</i>	R-12
Michał Czaja	R-14
Patryk Czapnik	B-50
<i>Michał Czerwiński</i>	B-19
<i>Jolanta Darul</i>	A-13
Aleksandra Deptuch	B-19
<i>Przemysław J. Dereń</i>	A-12
Alena Dolińska	B-3
<i>Przemysław Dopieralski</i>	A-20
<i>Sandra Drev</i>	R-20
Dawid Drozdowski	A-14, A-24, M-7
Krzysztof Dubert	B-49
Dominik Duch	B-26
<i>Michał Duda</i>	M-8
<i>Marta K. Dudek</i>	A-21, A-47, B-28, B-39
<i>Katarzyna Dul</i>	B-38
Kamil Filip Dziubek	R-3
<i>Błażej Dziuk</i>	B-11
<i>Krzysztof Ejsmont</i>	B-11
<i>Katarzyna Fedoruk-Piskorska</i>	A-14, M-7
<i>Aleksandra Felczak</i>	A-58
<i>Viljar Johan Femoen</i>	A-17
<i>Pierre Fertey</i>	B-48
<i>Dmitrii Fil</i>	A-7
<i>Mateusz Filipow</i>	B-19
Katarzyna Flor	A-42

Chris H. J. Franco	A-42, R-19
<i>Roger R. Fu</i>	B-15
<i>Nobuhisa Fujita</i>	R-20
<i>B. Fultz</i>	B-15
Michał Gacki	B-47
Zuzanna Gackowska	B-46
<i>Evgeny V. Galuskin</i>	A-28
<i>Irina O. Galuskina</i>	A-28
<i>Emilia Ganczar</i>	B-20
<i>Przemysław Gawęł</i>	B-10
Anna Gągor	A-14, A-16, A-15, B-21, M-7, M-14, R-7, R-23
<i>Edyta Gendaszewska-Darmach</i>	A-3
<i>Livia Getzner</i>	R-6
<i>Katarzyna Gibuła</i>	A-29, A-30, A-41
<i>Konstantin Glazyrin</i>	R-3
<i>Katarzyna Gobis</i>	B-25, B-29
Mateusz Gołdyn	B-45, B-59
<i>Anna M. Gołkowska</i>	B-9
<i>Antonina Gonet</i>	B-3
<i>Jerzy P. Goraus</i>	B-15
Evgeny Goreshnik	A-38, R-2
<i>Andrzej Górecki</i>	R-22
<i>Jakub Górniak</i>	A-43
<i>Beata Górska</i>	B-7
Szymon Grabowski	B-44
<i>Alexander Grippa</i>	A-12
<i>Marlena Gryl</i>	B-44
Paweł Grzyski-Ostreęga	B-13
Andrzej Gzella	A-37, A-43, B-22, B-24, B-43
<i>Karolina Gzyra-Jagięła</i>	B-7
Zofia Hajdaczuk	B-42
Zofia Hajdaczuk	M-3
<i>Michael J. Hall</i>	A-46
<i>Jadwiga Handzlik</i>	B-57
<i>Katarzyna Helios</i>	B-6
Felix Hennersdorf	R-10
<i>Neda Heydari</i>	B-33, B-60
<i>Jirka Hlinka</i>	M-9
<i>Maciej Hodorowicz</i>	A-36, B-55
<i>Marta Hoelm</i>	A-47
<i>Volodymyr Horishny</i>	B-43
Monika Hryniuk	M-11
<i>Jinping Hu</i>	B-15

<i>Andrii Hultiaiev</i>	R-2		
<i>Kyle Hunady</i>	B-15		
Valeryia Hushcha	A-57		
<i>Justyna Jackiewicz</i>	A-2		
Sepideh Jafari	A-45		
<i>Piotr Jakieta</i>	R-12		
Jan Janczak	B-41		
Agnieszka M. Janiak	R-8		
<i>Rafał Janicki</i>	B-35,	B-36	
<i>Sabina Jaros</i>	B-40		
<i>Katarzyna N. Jarzemska</i>	A-9,	M-1	
Mariusz Jaskólski	R-1		
<i>Andreja Jelen</i>	R-20		
Jagoda Hanna Jerzy	B-2		
<i>Aneta Jezierska</i>	A-49		
Mateusz Jóźwiak	A-22		
<i>Anna Jurowska</i>	A-36,	B-55	
<i>Ewa Juszyńska-Gałązka</i>	B-19		
<i>Adam Kabański</i>	A-14,	M-2,	M-7
Nadia Kaczorowska	B-40		
<i>Dariusz Kaczorowski</i>	A-19		
<i>Christelle Kadlec</i>	M-9		
<i>Karolina Kafarska</i>	B-47		
<i>Urszula Kalinowska-Lis</i>	A-57		
<i>Anna Kamecka</i>	A-31		
<i>Bożena Kamińska</i>	A-43		
Julia Kamińska	B-39		
Daniel M. Kamiński	R-22		
<i>Radostaw Kamiński</i>	M-1		
Julia Kamysz	B-1		
Zbigniew Karczmarzyk	A-31,	B-38	
<i>Bożena Karolewicz</i>	B-9		
Oskar Kaszubowski	B-37		
Andrzej Katrusiak	A-26,	B-14,	R-4, R-5
Michał Kaźmierczak	A-56		
Paulina Kielian	B-35		
<i>Ryszard Kierzek</i>	B-3		
<i>Agnieszka Kiliszek</i>	B-2,	B-3	
<i>Christopher Kingsbury</i>	A-34		
<i>Vasyl Kinzhybalo</i>	R-24		
<i>Andrzej Kochel</i>	A-49,	A-53	
<i>Anna Komasa</i>	B-59		
<i>Pavel Kopel</i>	M-12		
Oleksandr Korolevych	A-14,	A-15,	A-16, A-35, M-7

<i>Bartłomiej Kost</i>	A-47		
Adrian Krzysztof Kowaliński	B-34,	M-13	
Dorota A. Kowalska	A-19,	M-6,	R-24
Patryk Kowalski	A-6		
<i>Marcin Kowiel</i>	B-43		
Anna Kozakiewicz-Piekarz	B-33,	B-60	
Anna Koziół	B-32		
Dorota Krasowska	A-21,	B-39	
<i>Malwina Krause</i>	B-25		
Marta Krause	M-5		
Monika K. Krawczyk	A-50		
Jacek Krawczyk	B-12		
Marta S. Krawczyk	B-31		
Antoni Krawiec	B-11		
Kamil Krzemiński	A-55		
<i>Ewelina Ksepko</i>	A-8		
Maria Książek	A-28		
Olga Książkiewicz-Kołucka	A-54		
<i>Jakub Kubicki</i>	B-17		
<i>Robert Kudrawiec</i>	A-23		
<i>Dagmara Kulesza</i>	B-15		
<i>Piotr Kulinowski</i>	B-16		
Zuzanna Kurek	A-5,	B-4	
<i>Katarzyna Kurpet</i>	A-58		
<i>Joachim Kusz</i>	A-28		
<i>Petr Kužel</i>	M-9		
Anna Kwiecień	A-53		
<i>Miroslav Lebeda</i>	M-9		
<i>Karolina Ledwa</i>	A-42		
<i>Roman Lesyk</i>	B-43		
<i>Tadeusz Lis</i>	B-34		
<i>Andrzej Łapiński</i>	A-37,	B-22,	B-24, B-43
<i>Marta Łaszcz</i>	B-16		
<i>Paweł Ławniczak</i>	B-24		
<i>Marta Łoza</i>	B-9		
<i>Barbara Machura</i>	M-12		
<i>Longina Madej-Kietbik</i>	B-7		
<i>Izabela Madura</i>	A-34,	A-48,	A-55
<i>Lucia Maini</i>	R-5		
<i>Anna Makal</i>	A-44,	B-13,	B-26, B-46, B-51
Marcin Szymon Malecki	A-20		
Maura Malińska	A-52		
<i>Vladyslav Maliuzhenko</i>	R-24		

<i>Magdalena</i>	<i>Matecka</i>	<i>B-50</i>	
<i>Waldemar</i>	<i>Maniukiewicz</i>	<i>B-17</i>	
<i>Olga</i>	<i>Marchut-</i> <i>Mikołajczyk</i>	<i>A-6</i>	
Giovanna	Martins	<i>A-46</i>	
Barrionuevo			
<i>Martyna</i>	<i>Mateja-Pluta</i>	<i>B-2,</i>	<i>B-3</i>
<i>Przemysław</i>	<i>Matkowski</i>	<i>A-24</i>	
Karolina	Matuszak	<i>A-51,</i>	<i>M-10</i>
<i>Oksana</i>	<i>Matvienko</i>	<i>A-7</i>	
<i>Arkadiusz</i>	<i>Matwiczuk</i>	<i>R-22</i>	
<i>Zofia</i>	<i>Mazurkiewicz</i>	<i>A-24</i>	
<i>Marcin</i>	<i>Mączyński</i>	<i>B-52</i>	
<i>Mohamed</i>	<i>Mezouar</i>	<i>B-48</i>	
Maja	Mielcarz	<i>B-33,</i>	<i>B-60</i>
Natalia	Mikłuszka	<i>A-49</i>	
<i>Mariusz</i>	<i>Milik</i>	<i>B-5</i>	
<i>Natalia</i>	<i>Miniajluk-Gawel</i>	<i>A-24</i>	
Adam	Mizera	<i>A-37,</i>	<i>B-22, B-24, B-43, M-9</i>
Anna	Mocarska	<i>B-16</i>	
<i>Gábor</i>	<i>Molnár</i>	<i>R-6</i>	
<i>Marta</i>	<i>Morana</i>	<i>R-3</i>	
Maja	Morawiak	<i>A-48,</i>	<i>B-10</i>
<i>Barbara</i>	<i>Morzyk-Ociepa</i>	<i>A-33</i>	
<i>Marcin</i>	<i>Moskwa</i>	<i>A-20,</i>	<i>B-56</i>
Igor	Mossur	<i>B-8,</i>	<i>B-30</i>
Weronika	Mruszczyk	<i>B-23</i>	
Hubert	Mulczyński	<i>A-37,</i>	<i>B-22</i>
Krzysztof	Muszyński	<i>B-29</i>	
<i>Tadeusz</i>	<i>Muzioł</i>	<i>B-53</i>	
Igor	Naporowski	<i>A-4</i>	
Katarzyna	Niedośpiąt	<i>A-48</i>	
Dominika	Nielipińska	<i>A-3</i>	
Maciej	Nielipiński	<i>A-1,</i>	<i>R-17</i>
<i>Paulina</i>	<i>Nieścior-Browińska</i>	<i>A-41</i>	
<i>Wojciech</i>	<i>Nitek</i>	<i>B-57</i>	
<i>Marzena</i>	<i>Nowacka</i>	<i>A-2</i>	
Elżbieta	Nowak	<i>A-2</i>	
Przemysław	Nowak	<i>A-21,</i>	<i>A-47, B-28, B-39</i>
Maciej	Nowak	<i>B-9</i>	
Andrzej	Nowok	<i>B-21,</i>	<i>M-6, R-7</i>
<i>Marcin</i>	<i>Nowotny</i>	<i>A-2</i>	
Wiktoria	Objalska	<i>A-59</i>	
<i>Oliver</i>	<i>Oeckler</i>	<i>A-33</i>	
<i>Andrzej</i>	<i>Olczak</i>	<i>B-25,</i>	<i>B-29</i>

<i>Anna Olejniczak</i>	A-22
<i>Petr Ondrejko</i>	M-9
<i>Marta Orlikowska</i>	A-3
Magdalena Ostrycharz	B-25
<i>Lukáš Palatinus</i>	A-17
Damian Paliwoda	R-6
<i>Marcin Palusiak</i>	A-32, A-40, A-54
<i>Anastassios C. Papageorgiou</i>	B-1
<i>Jan Parafiniuk</i>	B-48
<i>Serhii Parkhomenko</i>	A-7
Kacper Paszczyk	A-9, M-1
Ewa Patyk-Kaźmierczak	A-27, A-56
<i>Mateusz Pączek</i>	B-19
<i>Maurizio Peruzzini</i>	R-3
<i>Rafał Petrus</i>	A-51, B-6, B-34, M-10, M-13
<i>Marta Piechocka</i>	A-13
<i>Agnieszka J. Pierzyk-Brzezinska</i>	A-1
Anna Pietrzak	B-28, B-47
<i>Agnieszka Joanna Pietrzyk-Brzezińska</i>	A-3, A-4, R-17
<i>Aneta Pindela</i>	B-43
<i>Edyta Pindelska</i>	A-48
<i>Karolina Pioruńska</i>	B-16
<i>Sevastian Piskunov</i>	B-32
Paweł Piszora	A-13
<i>Monika Pitucha</i>	B-38
<i>Aneta Pobudkowska-Mirecka</i>	A-48
<i>Tomasz Poręba</i>	B-48
<i>Kinga Potempa</i>	A-9, M-1
<i>Chandrasekaran Prabakaran</i>	A-2
Alicja Prężyna	A-44
<i>Michael R. Probert</i>	A-46
<i>Kamila Pruszkowska</i>	A-30
<i>Maciej Ptak</i>	A-12, M-6
<i>Anna Pyra</i>	B-52
Andrii Pyrih	A-43, B-43
<i>Cyril Rajnák</i>	M-12
<i>Paulina Ratajczyk</i>	R-5
Nadiia Rebrova	A-12
Piotr Rejnhardt	B-48
<i>Yasmine Remili</i>	R-6
<i>David A. Rincón</i>	A-52
Tetiana Romanova	A-19
<i>Anna Rosa</i>	A-29, A-30

<i>Thomas F. Rosenbaum</i>	B-15
Kinga Roszak	A-26
Magdalena N. Rowińska	A-15, A-16, M-14
<i>Milena Rożewska</i>	B-59
<i>Dominika Rubiak</i>	A-3
Gracjan Russ	A-11
Magdalena Ruszczak	A-29, A-41
<i>Natalia Rutkowska</i>	A-6
<i>Agnieszka Joanna Rybarczyk-Pirek</i>	A-59
Aleksandra Rydz	A-40
<i>Wojciech Rypniewski</i>	B-5
<i>Klaudia Rząd</i>	R-22
Natalia Sacharczuk	A-10
Marcin Sadłowski	R-12
Anna Sadocha	A-18, A-30, A-39
Jacek Sawka	M-12
<i>Demetrio Scelta</i>	R-3
<i>Patrycja Schab</i>	B-47
<i>Bartosz Sekuła</i>	A-1, A-4, A-6, R-17
<i>Jarosław Serafińczuk</i>	A-23
<i>Manuel Serrano-Ruiz</i>	R-3
<i>Vishali Sharma</i>	B-10
Svitlana Shishkina	R-18
<i>Paul Sicher</i>	A-33
<i>Adam Sieradzki</i>	B-21, M-6, R-7
Tomasz Sierański	B-7, B-8, B-27, B-30
<i>Daniel M. Silevitch</i>	B-15
<i>Agnieszka Skórska-Stania</i>	B-49, B-54, M-8
<i>Wojciech A. Sławiński</i>	B-48
Yurii Slyvka	A-38
Szymon Sobczak	A-10, A-11, B-14, R-5, R-7
Paulina Sobczak-Tyłuś	B-7, B-8
<i>Marcin Sobczyk</i>	A-49
<i>Piotr Sobota</i>	M-13
<i>Marcin Soczówka</i>	B-12
Klaudia Stachowiak	A-37, B-22
<i>Barbara-Veronika Stauber</i>	B-1
Wojciech Stawski	R-9
<i>Artur R. Stefankiewicz</i>	B-45
<i>Dagmara Stefańska</i>	A-15, A-16
Monika Anna Sternal	A-36
Amelia Stężalska	A-35
Amelia Stężalska	M-2
<i>Joseph Strauss</i>	B-1

Radosław Strzałka	A-25, B-18, M-4, M-5, R-20, R-21
Oliwia Strzechowska	A-34
<i>Vitali Stsiapura</i>	M-1
Szymon Suchecki	A-9
<i>Ela Sulkipli</i>	A-5, B-4
<i>Szymon Sutula</i>	B-48
<i>Thomas Svoboda</i>	B-1
<i>Stawomir Szafert</i>	A-20
<i>Małgorzata Szczesio</i>	B-25, B-29
<i>Przemysław Szklarz</i>	A-24
<i>Janusz Szklarzewicz</i>	A-36, B-55
Ksenia Szmigiel-Bakalarz	A-33
<i>Damian Szymański</i>	A-12
<i>Małgorzata I. Szyrkowska-Jóźwik</i>	B-17
Zuzanna Szypryt	M-8
<i>Katarzyna Ślepokura</i>	B-37, R-24
<i>Joanna Śliwiak</i>	B-5
Marcin Świątkowski	B-7, B-8, B-27, B-30
<i>Nina Tarzyńska</i>	B-7
Daniel Mariusz Tchoń	A-17
<i>Waldemar Tejchman</i>	B-57
<i>Michał Terlecki</i>	B-46
Paweł E. Tomaszewski	A-24
<i>Andrzej Trzepałka</i>	A-30
<i>Agata Trzęsowska-Kruszyńska</i>	B-7, B-8, B-30
<i>Arsenii Tymoshenko</i>	A-7
<i>Igor Ukrainets</i>	R-18
<i>Magdalena Urbanowicz</i>	B-16
Kamil Urbański	R-13
<i>Yevgeny Vapnik</i>	A-28
<i>Laure Vendier</i>	R-6
<i>Ihor Vorona</i>	A-7
<i>Mark Vovsianiker</i>	A-7
<i>Stanislav Vrtnik</i>	R-20
Dawid Wachnicki	A-8
<i>Marek Weselski</i>	B-15
Magdalena Wietrzyńska	A-23
<i>Paulina Wiśniewska</i>	B-53
<i>Mateusz Wiśniewski</i>	B-59
<i>Maciej Witwicki</i>	M-11, M-12
Marcin Wlazlak	A-32
Martyna Wojciechowska	B-20
<i>Jakub Wojciechowski</i>	B-13, R-24

Andrzej Wojtas	R-15
<i>Wojciech M. Wolf</i>	A-45, B-17, B-28, B-47
Janusz Wolny	A-25, B-18, R-20
<i>Maciej Woszczyk</i>	A-39
<i>Krzysztof Woźniak</i>	B-48
<i>Patryk Wójcik</i>	A-31
Sebastian Wroński	R-16
Patryk Wróbel	R-11
Waldemar Wysocki	A-31, B-38
<i>Kinga Wzgarda-Raj</i>	A-32, A-54, B-23
Roman Yavetskiy	A-7
<i>Žan Zakošek</i>	R-2
<i>Radosław Zaleski</i>	R-22
<i>Ewelina Zaorska</i>	A-52
Anna Zep	A-29, A-30, A-41
Marta Zezula	A-29, A-30, A-41
Kacper Zielak	A-1
<i>Dorota Zielińska</i>	B-7
<i>Grzegorz Zieliński</i>	A-28
Sylwia Zięba	A-37, B-22, B-24, B-43, M-9
<i>Aleksandra Zimon</i>	B-17
Marcin Ziobro	B-35, B-36
Maciej Żak	A-25, M-4, R-21
Andrzej Żarczyński	B-17
Ewa Żesławska	B-57

