Raport z konferencji ECDM7

Krzysztof Woźniak i Paulina Dominiak

W dniach 26 czerwca – 1 lipca 2016r. w budynku Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego odbyła się 7-ma Europejska Konferencja na temat Gęstości Elektronowej - 7th European Charge Density Meeting (ECDM7). Organizatorami konferencji były następujące instytucje: Uniwersytet Warszawski (Wydział Chemii UW), Polska Akademia Nauk (Komitet Krystalografii PAN) oraz Polskie Towarzystwo Krystalograficzne. Personalnie konferencja ECDM7 zorganizowana była przez Lokalny Komitet Organizacyjny w składzie: Krzysztof Woźniak –Przewodniczący, Paulina Dominiak - vice-przewodnicząca, Anna Makal – Sekretarz oraz następujący członkowie: Michał Chodkiewicz, Sławomir Domagała, Roman Gajda, Maria Górna, Anna Hoser, Joanna Krzeszczakowska, Maciej Kubicki (Wydział Chemii UAM), Marcin Kubsik, Katarzyna Stadnicka(Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego) i Damian Trzybiński. Członkowie Komitetu Organizacyjnego bez przypisanej afiliacji pochodzili z Wydziału Chemii UW. W konferencji uczestniczyło 114 osób z kilkunastu krajów z całego świata, w tym: 31 osób z Polski, 25 osób z Niemiec, 10 osób z UK, po 7 osób z Francji i Słowacji, po 6 osób z Australii, Danii i Rosji, 4 osoby z USA, po 2 osoby z Włoch, Szwajcarii, i po jednej osobie z Belgii, Indii, Brazylii, Słowenii, Tajwanu, Chin, Hiszpanii i Czech.

Część oficjalna konferencji ECDM7 rozpoczęła się o godzinie 17-tej w niedziele 26-tego czerwca 2016r. od krótkiego powitania przez przewodniczącego i zastępcę przewodniczącego Komitetu Organizacyjnego oraz przez Prof. Piotra Węgleńskiego – Dyrektora CENTu. Niestety, szalejąca na dworze niezwykle intensywna burza uniemożliwiła dotarcie kilku innych zaproszonych VIP-om, lub spowodowała ich opóźnienie. Dużo szczegółów związanych z ECDM7 oraz książkę abstraktów i galerię zdjęć konferencyjnych można znaleźć pod adresem: http://ecdm7.chem.uw.edu.pl/

W części merytorycznej, pierwszej sesji przewodniczył Dietmar Stalke z Uniwersytetu w Getyndze. W trakcie sesji wysłuchaliśmy dwóch wykładów: (1) „A brief history of chargé density analysis" wygłoszonego przez Marka Spackmana z Uniwersytetu Zachodniej Australii w Perth (Australia) oraz (2) „Past and recent developments of experimental charge density studies – a European perspective" zaprezentowanego przez Wolfganga Scherera z Uniwersytetu w Augsburgu (Niemcy). Wykłady wzbudziły duże zainteresowanie i ciekawą dyskusję oraz przypomniały najważniejsze osiągniecia i milowe kroki w rozwoju eksperymentalnych badań gęstości elektronowej, w szczególności podkreśliły rolę, na przykład, takich osób jak Prof. Robert Stewart, których dorobek może nie jest właściwie doceniany. Po sesji merytorycznej, przez kolejne 2-3 godziny, odbyło się spotkanie koleżeńskie typu „Welcome Party" – spotkanie z jednej strony grupy starych znajomych działających na tym pole od lat z nowymi młodymi osobami, których sporo pojawiło się na ECDM7.

Fig 1. (a) Otwarcie Konferencji Przewodniczący i Vice-Przewodnicząca Komitetu Organizacyjnego, (b) wykład Prof. Scherera, (c) sala wykładowa z uczestnikami konferencji.

Poniedziałkowa sesja poranna dotyczyła błędów w teoretycznych oraz eksperymentalnych badaniach gęstości elektronowej. Sesji przewodniczyli Piero Macchi (Szwajcaria) oraz Simon Coles (UK). Sesję otwierał wykład Juliana Henna (Niemcy) dotyczący wskaźników jakości dopasowania modelu do mierzonych danych dyfrakcyjnych (ang.: „About Fit Quality Indicators"). Prezentowane prace dr Henna otwierają możliwości systematycznej oceny jakości mierzonych danych dyfrakcyjnych i stwarzają możliwość znajdowania związku między jakością końcowych parametrów udokładnienia a jakością używanych danych dyfrakcyjnych. Następnie Vaclaw Petricek z Instytutu Fizyki w Pradze przedstawił zasady analizy danych dyfrakcyjnych w pakiecie oprogramowania Jana2006. Prof. Petricek właśnie otrzymał najwyższą europejską nagrodę krystalograficzną – 9-tą Nagrodę im. Maxa Perutza Europejskiego Towarzystwa Krystalograficznego (ECA), która będzie mu wręczona w czasie najbliższego tegorocznego kongresu ECA w Szwajcarii – składamy serdeczne gratulacje. Kolejny wykładowca Regine Herbst-Irmer z Getyngi przedstawiła zasady empirycznej poprawki, zależnej od temperatury i rozdzielczości danych, uwzględniającej wpływ TDS (termicznego rozpraszania dyfuzyjnego). Następnie Krzysztof Woźniak

przedstawił wykład zatytułowany „A century after the Braggs: on precision and accuracy of X-ray results" pokazując jak jakość parametrów strukturalnych i termicznych, oraz ich błędów, uzyskane w wyniku udokładnienia tych samych zmierzonych rentgenowskich danych dyfrakcyjnych zależą od użytego w udokładnieniu modelu gęstości elektronowej oraz od rozdzielczości zmierzonych danych rentgenowskich. Okazało się, że najlepsze wyniki uzyskuje się używając udokładnienia metodą Hirshfelda (HAR). Wykład ten wygłoszony był w miejsce wykładu Bartolomeo Civalleri, który nie mógł uczestniczyć w ECDM7. Kolejny prezenter, Christian Jelsch z Uniwersytetu w Nancy, przedstawił komunikat dotyczący wiarygodności parametrów uzyskiwanych gęstości elektronowych oraz parametrów pochodnych, a sesję zakończył świetny wykład Matthiasa Gutmanna z ISIS w Chilton (UK) poświęcony różnym aspektom monokrystalicznych badań neutronowych. Wyniki neutronowe, szczególnie dla atomów wodoru (ich pozycje oraz czynniki temperaturowe), są często razem udokładniane z danymi rentgenowskimi i jest niezwykle istotne aby wiedzieć, jakie są ograniczenia i zalety dyfrakcyjnych danych neutronowych. Po tym wykładzie była dłuższa dyskusja na temat zasad dostępu do dużych centrów fizyki mamuciej (synchrotronów oraz stacji neutronograficznych. Sesja ta sponsorowana była przez Rigaku Oxford Diffraction.

Po przerwie obiadowej, w trakcie której odbyła się półgodzinna sponsorska sesja obiadowa firmy Bruker, odbyła się kolejna sesja konferencyjna zatytułowana: „New approaches in modeling of charge density and thermal motion". Sesji przewodniczyli Simon Grabowsky oraz Angel Martin Pendas. Sesję otwierał przeglądowy wykład Birgera Dittricha z Dusseldorfu zatytułowany: „On hydrogen-atom treatment in high-quality single crystal structure analysis". Następnie Anders Østergaard Madsen przedstawił komunikat dotyczący połaczenia wyników związanych z dynamiką sieci krystalicznej oraz udokładnienia multipolowego (ang.:" Combining multipole refinements and lattice dynamics: a case-study of L-alanine"). Kolejny komunikat przedstawiony był przez Lukasza Bučinský'ego z Bratysławy (Słowacja) i dotyczył efektów relatywistycznych w udokładnieniach multipolowych związków zawierających ciężkiej jony i atomy (ang.:"Is relativity the hammer in charge density of heavy elements and their compounds? How heavy is the hammer - how heavy is heavy metal?"). Następnie Dr Alessandro Genoni z Paryża przedstawił wyniki badań korelacji elektronowej w swoim komunikacie zatytułowanym: „Can the X-ray constrained wave function methods extract electron correlation effects on the electron density?" oraz Magdalena Woinska (Warszawa, Wydział Chemii UW) zaprezentowała wyniki dotyczące udokładnienia funkcji falowych: " X-ray wave function refinement - overcoming the limitations of the multipole model". Sesję zakończył wizjonerski wykład Dylana Jayatilaki z UWA, Perth, Australia zatytułowany: "A tale of two densities". Konferencyjny poniedziałek zakończyła pierwsza sesja posterowa (formalnie w godzinach od 17 30 do 19 00), która przeciągnęła się dla niektórych do późnych godzin nocnych. W trakcie poniedziałkowej i wtorkowej sesji posterowej intensywnie pracowała Komisja ds. Wyboru Najlepszych Posterów konferencyjnych, której przewodniczącym był Mark Spackman (Australia). W składzie Komisji znaleźli się, oprócz przewodniczącego, Dietmar Stalke z Uniwersytetu w Getyndze, John Halliwell (Diamond, UK) oraz Marcus Winter (Rigaku).

Figura 2. (a) Komunikat Prof. Petricka oraz stoiska wybranych sponsorów ECDM7: (b) Rigaku, (c) Bruker.

We wtorek pierwsza sesja naukowa zatytułowana była: „Challenging experiments for charge densities". Sesji przewodniczył Carlo Gatti (Włochy) oraz Christian Lehman (Niemcy). W sesji tej były dwa zaproszone wykłady: otwierający sesję wykład Johna Halliwella (poprzedniego laureata nagrody M. Perutza ECA; Diamond, Chilton, UK) zatytułowany: „Concerning measurement errors in synchrotron X-ray charge density studies" oraz wykład Jacoba Overgaarda (Aarhus, Dania): „Insights into single molecule magnetism from charge and spin density studies". Wykłady te uzupełnione były następującymi komunikatami: „The resolution dependence of aspherical core refinements: the case of light atoms " – Andreasa Fishera, "Probing chirality with high energy synchrotron light" - Vadima Diadkina, Experimental and theoretical electron density analysis of copper pyrazine nitrate quasi-low-dimensional quantum magnets" - Leonardo H. R. Dos Santosa, "Nuclear dynamics in the metastable phase of the solid acid caesium hydrogen sulfate" – przedstawiony przez naszego rodaka pracującego w ISIS Chilton (UK) Mateusza Krzystyniaka, oraz "Chemical bonding in boron polymorphs and boron carbid" - Sandera van Smaalena. Poza wykładami

zaproszonymi, szczególnie dwa komunikaty są warte podkreślenia: dotyczące udokładnienia elektronów rdzenia w modelu multipolowym (Andreasa Fishera) oraz świetnie przedstawiony komunikat Krzystyniaka mówiący o tym jak w niezależny sposób od metod dyfrakcyjnych można otrzymać atomowe czynniki temperaturowe (ADPs). Jest to obecnie jeden z kluczowych problemów współczesnej krystalografii. We wtorek w trakcie przerwy obiadowej prezentowała się firma Rigaku Oxford Diffraction, a po obiedzie odbyła się sesja zatytułowana: „Charge densities in the life sciences", której przewodniczyli J. Halliwell oraz Maciej Kubicki (UAM, Poznań).

Figura 3. (Góra) (a) Przerwa na obiad, (b) sala wykładowa oraz prezentujący zaproszony wykład Matthias Gutmann (c), sesja posterowa (d); (dół) M. Spackman w końcu ustalił zwycięzców konkursu na najlepszy poster, W. Baumeister (Inst. Maxa Plancka w Monachium) w dyskusji z Benem Luisi (Wydział Biochemii Uniwersytetu w Cambridge) oraz Marią Górną (CNBCh UW, Warszawa).

Sesję otwierał zaproszony wykład Władka Minora (Charlotesville, USA) poświęcony powtarzalności w naukach biomedycznych (ang:" Reproducibility in biomedical sciences"). Jednym z szokujących wniosków z tego wykładu jest stwierdzenie, że jedynie bardzo mały procent czasu w supercentrach fizyki mamuciej jest efektywnie wykorzystywany na pomiary dyfrakcyjne białek, których struktury są później publikowane. Następnie Profesor Kenneth M. Merz Jr. z USA przedstawił wykład: „Using QM methods to refine biological structure" oraz Prof. Jean-Philip Piquemal z paryskiej Sorbony zaprezentował: "GEM, a force field based on density fitting for scalable molecular dynamics simulations". Sesję uzupełniały komunikaty Giovaniego Maciettiego – "Study of the key interactions in the self-recognition of the antimalarial drug chloroquine" oraz Floriana Kleemiß'a : "Crystal and enzyme environmental effects on the electron density of a cysteine protease inhibitor ". Po sesji naukowej, w godzinach 17 30 – 19 00 odbyła się druga część sesji posterowej oraz zamknięte zebranie członków Komisji IUCr zajmującej się gęstością elektronową oraz spinową.

Środa rozpoczęła się poranną sesją zatytułowaną: „From conceptual quantum chemistry to properties of molecules and crystals". Sesji przewodniczyli Anders Madsen and Birger Dittrich. W sesji tej Prof. Patrick Bultinck przedstawił wykład: „Information entropy towards atoms in molecules", a Lucjan Piela z Wydziału Chemii UW ciekawy komunikat dotyczący zdefiniowania warunków ewentualnego przyciągania się elektronów: „Can electrons attract each other?". Następnie Alexey I. Baranov z Moskwy zaprezentował komunikat:" Revealing the role of spin-relativistic effects on bonding in molecules and solids". Drugą część sesji rozpoczął zaproszony wykład Angela Pendasa dotyczący roli pól skalarnych i wektorowych w badaniach topologicznych właściwości cząsteczek ("Some emergent scalar and vector fields in Quantum Chemical Topology"). Kolejne trzy komunikaty dotyczyły zastosowań. I tak Martin Breza (Bratysława, Słowacja)) omówił ciekawe właściwości QTAIM tetraedrycznych kompleksów jonów grupy IVa, a Olga Matthies (Drezno, Niemcy) analizę przejścia fazowego typu diament – β-Sn pierwiastków należących do 14-tej grupy układu okresowego. Sesję zakończył wykład Anny Vologzhaniny z Moskwy na temat zastosowania komórek Voronoi'a do analizy właściwości QTAIM wewnątrz- międzycząsteczkowych wiązań w związkach organometalicznych. W trakcie przerwy obiadowej zorganizowaliśmy nieformalną wycieczkę do naszych laboratoriów krystalograficznych w Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych. W trakcie wycieczki – która zyskała dużą popularność (uczestniczyło kilkadziesiąt osób). Pokazaliśmy nasz sprzęt rentgenowski, i pozostałe wyposażenie, używane obecnie w Pracowni Krystalochemii oraz w Laboratorium Badań Strukturalnych, a także ten znajdujący się we właśnie otwieranym Laboratorium Badań

Biomakromolekularnych (CNBCh). Taką wycieczkę powtórzyliśmy jeszcze raz w trakcie przerwy obiadowej w czwartek. W praktyce ok. 80% uczestników konferencji obejrzało nasze laboratoria (wielu z nich robiło zdjęcia, aby starać się o podobny sprzęt do swoich potrzeb, a kilka osób wyraziło chęć przyjazdu do nas na staż lub chęć podjęcia pracy).

Figura 4. (Góra) Kolejno od strony lewej: P. Bultinck, A. Pendas, pytanie D. Jayatiliaki, L Piela; (dół) przerwa na kawę – oddziaływania 2- i wielociałowe, biuro konferencyjne, pokój sąsiedni w stosunku do auli wykładowej dla tych co muszą coś zrobić przy pomocy komputera a jednocześnie chcą się przysłuchiwać wykładom bez przeszkadzania innym słuchaczom.

Po przerwie obiadowej w środę odbyły się 4 wycieczki po Warszawie. Program wycieczek obejmował: Stare Miasto i Trakt Królewski, Stare Miasto i Łazienki, Muzeum Powstania Warszawskiego i Stare Miasto oraz Muzeum Historii Żydów Polskich

Figura 5. Wycieczki po Warszawie.

Czwartek poświęcony był zastosowaniom eksperymentalnych i teoretycznych badań gęstości elektronowej w inżynierii krystalicznej oraz w celu zrozumienia natury właściwości fizycznych i chemicznych ciała stałego. Sesja „Understanding & engineering solid state materials", której przewodniczyli Mark Spackman z UWA w Perth oraz Josef Kozisek z Bratysławy, rozpoczęła się od wykładu Prof. Clauda Lecomte'a z Uniwersytetu w Nancy na temat: „When experimental charge and spin density data challenge ab initio and DFT calculations". W wykładzie tym Prof. Lecomte wskazuje, że nie można danych teoretycznych stosować bezkrytycznie ponieważ one mogą prowadzić do błędnych konkluzji. Następnie uczestnicy z dalekiej Australii Mingwen Shi oraz Sajesh P. Thomas zaprezentowali komunikaty dotyczące oddziaływań elektrostatycznych w układach typu gospodarz-gość oraz analizę energii wiązania w kryształach wykazujących odkształcenia plastyczne. Po przerwie na kawę Tonglei Li (Pardew University, USA) zaprezentował kolejny zaproszony wykład zatytułowany „Locality of intermolecular interactions in organic crystals" i nastąpiła seria niezwykle interesujących komunikatów dotyczących: natury oddziaływań I…N oraz F…F (Davide Franchini – Milan, Włochy), związku między upakowaniem cząsteczek w kryształach i oddziaływaniami w układach donorowo-akceptorowych (Ivan V. Fedyanin - Moskwa, Rosja), termofizycznych i chemicznych właściwości kryształów cieczy jonowych (Yulia Nelyubina - Moskwa, Rosja), interpretacji diagramów Lewisa w świetle wyników badań gęstości elektronowych (Dietmar Stalke – Uniwersytet w Gettyndze, Niemcy)), anionom z właściwościami chemicznymi kationów na przykładzie reaktywności $[B_{12}X_{11}]^-$ (Simon Grabowsky – Uniwersytet w Bremie, Niemcy), dyspersji pary elektronowej w regularnym tlenku arsenu (Piotr Guńka – Politechnika Warszawska), naturze oddziaływań w zgiętych metallocenach (Rumpa Pal - Australia) oraz analizie polaryzowalności atomów w cząsteczkach w funkcji sposobu partycji gęstości elektronowej (Piero Macchi - Szwajcaria). Ta praktycznie trwająca cały dzień sesja zakończyła się ok. godziny 16-tej.

Figura 6. Komunikaty (od lewej): Prof. Dietmar Stalke, Prof. Simon Grabowsky, Rumpa Pal, Prof. Piero Macchi.

O godzinie 17:15 wszyscy uczestnicy zostali przewiezieni autokarami do Teatru Kamienica w Warszawie, gdzie najpierw odbyły się porywające występy akademickiego zespołu pieśni i tańca UW Warszawianka, a po występach uczestnicy konferencji ECDM7 mieli w tymże teatrze kolacje konferencyjną. Ponieważ nagrody za najlepsze postery były współsponsorowane m.in. przez IUCr, przed ich rozdaniem Prof. Sine Larsen przedstawiła cele i metody działania Międzynarodowej Unii Krystalograficznej, a następnie przewodniczący Komisji ds. Najlepszych Posterów Mark Spackman (UWA, Perth, Australia) przedstawił wyniki działań komisji. Laureatami nagród zostali:

1. Nagrody R. Stewarta (The Stewart Prize): Anna A. Hoser, Ioana Sovago and Anders Ø. Madsen za poster numer 41 zatytułowany: "Aspirin polymorphs revisited".
2. Nagrody bezimiennej (Best Poster Prize): Malte Fugel, Florian Kleemiß, Lorraine Andrade Malaspina and Rumpa Pal za poster P23 zatytułowany: "Investigation of the hypervalency in polyoxoanions via theoretical and experimental charge density studies",
3. Nagrody bezimiennej (Best Poster Prize): Lennard Krause, Regine Herbst-Irmer and Dietmar Stalke za poster P1 zatytułowany: "Validation of charge density refinement strategies"
4. Nagrody ufundowanej przez firmę Rigaku (the Rigaku Oxford Diffraction Prize): Anna Krawczuk i Piero Macchi za poster numer P28 zatytułowany: "PolaBer - distributed atomic polarizabilities approach".

Następnie organizatorzy przyszłej konferencji ECDM8 (Dietmar Stalke oraz Simon Grabowsky) przedstawili miejsce kolejnej konferencji, która odbędzie się w 2019 roku w Getyndze (Niemcy). Po deserze była możliwość oglądania meczu piłkarskiego reprezentacji Polski z Portugalią. Niestety mimo naszego dopingu Polacy mecz przegrali, co nieco popsuło nam ten świetny wieczór. Kolacja zakończyła się ok. godziny 23 00.

Figura 7. (Góra) Występ Warszawianki oraz kolacja konferencyjna, (dół) prezentacja IUCR w wykonaniu Prof. Sine Larsen (Dania), laureaci nagród w otoczeniu organizatorów i członków Komisji ds. Nagród, mecz Polska – Portugalia.

Ostatni dzień konferencji (1-wszy lipca) poświęcony był głównie krio-mikroskopii elektronowej, która to metoda jest niewątpliwym przebojem ostatnich kilku lat. W ramach tej sesji, której przewodniczył Wolfgang Scherer (Augsburg, Niemcy), wysłuchaliśmy trzech zaproszonych wykładów: „Electronic cryomicroscopy: from molecules to cells" Wolfganga Baumeister'a z Instytutu Maxa Plancka w Monachium (Niemcy), Approaching the physical limits of electron cryomicroscopy for structure determination Christophera J. Russo z MRC Cambridge (UK) oraz wykładu Philipa Nakashimy z Australii zatytułowanego "Towards the measurement of bonding in and around inhomogeneities in nano-composite materials". W.

Baumaister zaprezentował niesamowite możliwości tej techniki badawczej i mnóstwo spektakularnych przykładów potężnych struktur białkowych, które zostały wyznaczone z rozdzielczością atomową rzedu ok. 3 Angstremów w/w techniką. Wykład Ch. Russo skoncentrowany był na aspektach technicznych i metodologicznych i wykład ten - jak i dyskusja po nim - uświadomiła uczestnikom, że oba pola badawcze mogą niesamowicie zyskać na współpracy specjalistów z tych dziedzin. Ostatnim wykładem merytorycznym na konferencji ECDM7 był wykład Philipa Nakashimy z Australii zatytułowany „Towards the measurement of bonding in and around inhomogeneities in nano-composite materials" i poświęcony analizie właściwości wiązań w niezwykle trudnych układach do badań czyli w nanokompozytach.

Następnie nastąpiło zamknięcie 7-ej Międzynarodowej Konferencji na Temat Gęstości Elektronowej i ostatni lunch, po którym uczestnicy rozjechali się do swoich domów. Część z uczestników wzięła udział w odbywającym się bezpośrednio po obiedzie otwarciu nowego laboratorium (Laboratorium Badań Biomakromolekularnych), które odbyło się w Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych Uniwersytetu Warszawskiego.

Figura 8 (Góra od lewej): Dr Ch. Russo, Prof. Ph. Nakashima, (srodek)zamknięcie ECDM7 oraz ostatnie dyskusje przed wyjazdem; (dół) zdjęcie konferencyjne uczestników ECDM7 (w pierwszym rzędzie od lewej: Prof. Merz (USA), Prof. Woźniak – Chairman KO, Dr hab. Pauliona Dominiak – Vice-chairperson of KO, Prof. Pierre Becker (Francja) oraz Prof. Mark Spackman (Australia).

Komitet Organizacyjny ECDM7 serdecznie dziękuje wszystkim sponsorom tej konferencji w tym: Polskiej Akademii Nauk (w szczególności Komitetowi Krystalografii PAN), firmom Rigaku Oxford Diffraction oraz Bruker, IUCr, ECA, Oxford Cryosystem, STOE, AXO, DECTRIS, CENT, Uniwersytetowi

Warszawskiemu (a w szczególności Wydziałowi Chemii UW) za wsparcie finansowe lub organizacyjne konferencji ECDM7.

Krzysztof Woźniak i Paulina Dominiak, Wydział Chemii UW, Warszawa
Przewodniczący i Vice-Przewodniczący Komitetu Organizacyjnego ECDM7