

## IZVJEŠTAJI SA SKUPOVA



Hrvatska udruga kristalografa (HUK)  
Organizacijski odbor



## Izješće

## 29. EUROPSKI KRISTALOGRAFSKI KONGRES

23. – 28. kolovoza 2015.  
Rovinj • Hrvatska



### A. Višnjec\*

Institut Ruđer Bošković  
Laboratorij za kemijsku i biološku kristalografiju  
Zavod za fizičku kemiju  
Bijenička cesta 54  
HR-10 000 Zagreb

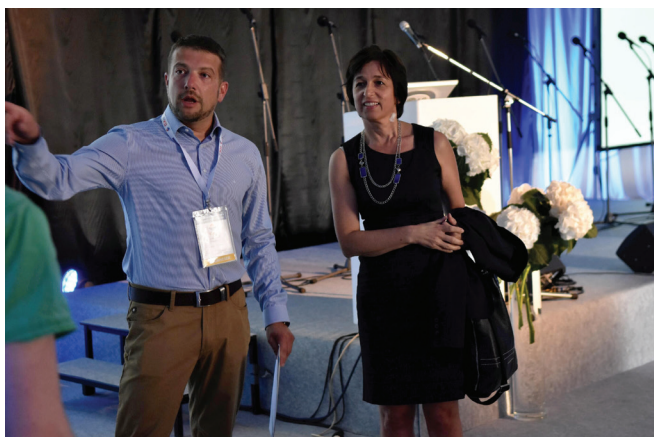
U Rovinju je od 23. 8. 2015. do 28. 8. 2015. u organizaciji Hrvatske udruge kristalografa (HUK) i pod pokroviteljstvom Ministarstva znanosti, obrazovanja i sporta Republike Hrvatske (MZOS) održan 29. Europski kristalografski kongres (ECM29), uz sudjelovanje 1050 znanstvenika i stručnjaka iz područja kristalografije i srodnih disciplina iz 50 zemalja sa svih šest kontinenata, što ECM29 čini najvećim znanstvenim skupom prirodoslovaca do sada održanim u našoj zemlji, i najvećim europskim kristalografskim kongresom u povijesti njihova održavanja. Kristalografija je interdisciplinarna znanost koja se nezaustavljivo razvija na točki dodirnice fizike, kemije, biologije i raznih područja tehnologije. Ona omogućuje neposredni uvid u trodimenzijsku unutarnju strukturu tvari, uključivo biološke makrostrukture poput, primjerice, proteina ili virusa, pa je njezin streloviti razvoj posljednjih desetljeća donio pravu revoluciju u dizajnu novih lijekova, te razvoju novih materijala do nedavno nezamislivih svojstava. Takav značaj kristalografije za dobrobit čovječanstva prepoznala je i Opća skupština UN-a proglašivši prošlu, 2014. godinu – Međunarodnom godinom kristalografije (IYCr2014). Time je na najbolji način obilježena i 100-ta obljetnica temeljnih otkrića u kristalografiji – Röntgenovog otkrića "x-zraka", von Laueovih otkrića difrakcije tih zraka na kristalima te Braggovog zakona. Hrvatski su kristalografi obilježili IYCr2014 nizom znanstvenih skupova i izdavačkih pothvata, što je bio sjajan uvod u uspješnu organizaciju ECM29.



Slika 1 – Organizatori ECM29 s radnim timom mladih kristalografa

Najveći broj sudionika ECM29 došao je iz Njemačke (191), dok je Hrvatska po broju registriranih sudionika zauzela vrlo visoko, deseto mjesto među 50 zemalja s čak 31 aktivnim sudionikom na Skupu. Ovako masovno sudjelovanje hrvatskih znanstvenika na ECM29 omogućeno je nizom organizacijskih i financijskih olakšica, koje je za hrvatsku kristalografsku zajednicu osmislio Organizacijski odbor ECM29 s ciljem što kvalitetnijeg predstavljanja povijesti i aktualnog trenutka hrvatske kristalografije europskoj i svjetskoj znanstvenoj, poglavito kristalografskoj javnosti. 55 mladih znanstvenika iz 26 zemalja dobilo je financijsku potporu Organizacijskog odbora ECM29, koja im je omogućila sudjelovanje na Skupu. ECM29 je oborio povijesne rekorde europskih kristalografskih skupova i po broju dodijeljenih posterskih nagrada (20) i po broju satelitskih konferencija (10). 14-člani Organizacijski odbor ECM29 vodili su Aleksandar Višnjec s IRB-a, kao predsjednik i Marijana Đaković s Kemijskog odsjeka PMF-a Sveučilišta u Zagrebu, kao dopredsjednica. Tehnički dio organizacije ECM29 povjeren je agenciji *Globtour Event d. o. o.* iz Zagreba, koja je svoj dio posla odradila profesionalno i kvalitetno, te tako snažno doprinijela sveopćem uspjehu Skupa.

\* Dr. sc. Aleksandar Višnjec, predsjednik Organizacijskog odbora ECM29 i predsjednik Hrvatske udruge kristalografa  
e-pošta: aleksandar.visnjec@irb.hr



Slika 2 – Ružica Beljo-Lučić, zamjenica Ministra znanosti obrazovanja i sporta RH, u pratnji domaćina, Aleksandra Višnjevca, predsjednika OO ECM29

## Znanstveni program

Službeni znanstveni program ECM29, za koji je prijavljeno ukupno 785 znanstvenih priopćenja, sastojao se od dva plenarna predavanja, 16 pozvanih predavanja, 248 usmenih izlaganja raspoređenih u 50 mikrosimpozija, te čak 521 poster. Ovaj je, brojka, sadržajem i imenima predavača, vrhunski znanstveni program, rezultat višemjesečnog neumornog rada 15 interesnih skupina unutar ECA-e, čije je prijedloge koordinirao 36-člani međunarodni programski odbor ECM29 na čelu s Nenadom Banom i Marijom Luić. Plenarna predavanja, oba pred prepunom velikom dvoranom Adris Exhibition and Convention Centre-a (AECC), kapaciteta 1000 osoba, održali su Henry Chapman sa Sveučilišta u Hamburgu (prvog radnog dana konferencije, 24. 8. 2015.) te Andrea Ferrari, direktor Centra za istraživanje grafena Sveučilišta u Cambridgeu (zadnjeg radnog dana konferencije, 27. 8. 2015.). Prof. Chapman, kao jedan je od pionira XFEL-a, najnovije kristalografske tehnike od koje se očekuju spektakularni proboji u području strukturne biologije i biomedicine, održao je predavanje *Serial crystallography with X-ray free-electron laser pulses*. XFEL omogućuje dobivanje strukturnih informacija (uz razlučivanje bolje od 2 Å, dakle, *de facto*, na razini standardnog međuatomskog razmaka) biomakromolekula iznimno rezistentnih na kristalizaciju, čiju strukturu do sada, tradicionalnim kristalografskim tehnikama, nije bilo moguće rasvijetliti. Prof. Ferrari je u svom nadahnutom predavanju *Graphene Future Emerging Technology* predstavio najnovija dostignuća u istraživanjima grafena – istinskog materijala budućnosti. Teme 16 pozvanih predavanja donekle zrcale dominaciju makromolekularne kristalografije i strukturne biologije u današnjoj kristalografskoj zajednici. Različitim aspektima te problematike predstavilo se čak 5 od ukupno 16 pozvanih predavača: Tim Clausen s Instituta za molekularnu patologiju u Beču, Leonid Sazanov s austrijskog Instituta za znanost i tehnologiju, Andrea Dessen s Instituta za strukturnu biologiju iz Grenoblea, Christoph Müller s EMBL-a u Heidelbergu te Titia Sixma s Nizozemskog instituta za istraživanja raka. Netradicionalne metode i najnovije teorije u kristalografskim istraživanjima predstavili su Michael Hanfland s ESRF-a u Grenobleu (kristalografija u uvjetima visokih tlakova), Emil Božin s Brookhaven National Laboratory iz Uptona, NY (od simetričnog do nesimetričnog stanja), Carlo Gatti s Instituta za molekularne znanosti i tehnologiju u Milanu (gustoća naboja i spina), Ron Lifshitz s Raymond & Beverly Sackler School of Physics and Astronomy iz Tel Aviva (kvazikristali), Karen Friese s JCMS u Jülichu (kristalografija u neatmosferskim uvjetima), Sandra van Aert sa Sveučilišta u Antwerpenu (elektronska kristalografija) te Matias Berger s Instituta za fiziku i astronomiju u Potsdamu (dinamika kondenzirane tvari). Usprkos očitoj prevazi

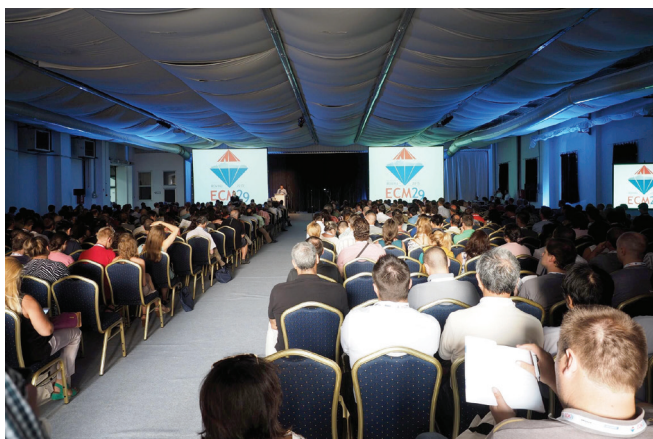
najnovijih dostignuća u kristalografiji, programski odbor nije zaboravio niti tradicionalne teme koje su, uostalom, i zaslužne za današnji presudni značaj kristalografije u razvoju novih materijala i dizajnu lijekova. Tako je Carl Henrik Görbitz s Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Oslu održao pozvano predavanje o istraživanju strukture aminokiselina uz upotrebu kristalografskih baza podataka, Jonathan Steed sa Sveučilišta u Durhamu predstavio je istraživanja u području klasičnog kristalnog inženjeringa (kristalizacija vs. geliranje), Paul Raithby sa Sveučilišta u Bathu diskutirao vezu molekularne strukture i luminiscencije, a George Sheldrick sa Sveučilišta u Göttingenu, tvorac SHELX-a, najpopularnije programske podrške za rješavanje kristalnih struktura, osvrnuo se na najnovije algoritme kojima su, posljednjih godina, nadograđene prijašnje inačice ove miške kristalografske programske podrške.



Slika 3 – Andrea Ferrari, plenarni predavač s predsjedavajućom predavačicom, Judith Howard

Neslužbeni dio znanstvenog programa odvijao se tijekom pauza za ručak, svakog radnog dana Skupa, od 12 h do 15 h. Tijekom sva četiri radna dana konferencije u tom terminu se održavao iznimno dobro posjećen Sajam programske podrške za kristalografiju (Crystallographic software fayre), na kojem je svoja softverska rješenja predstavilo 16 znanstvenika, među ostalima i Zoran Štefanić, član HUK-a i znanstveni suradnik IRB-a, koji je predstavio *AbstractsECM*, potpuno automatizirani sustav za slanje i recenziranje sažetaka i pripremu programske i knjige sažetaka za ECM-ove. U istom terminu su održani i sponzorirani seminari u organizaciji NanoMEGAS-a (*Workshop on PDF analysis of amorphous and nanocrystalline materials from electron diffraction*, 24. 8. 2015), Brukera i Incoateca, dijamantnih sponzora ECM29 (26. 8. 2015.) te Cambridge Crystallographic Data Centrea (27. 8. 2015.), u povodu pedesete obljetnice od utemeljenja Cambridge Structural Database (CSD), danas najveće baze kristalografskih podataka na svijetu, koja sadrži više od 800 000 pohranjenih kristalnih struktura.

Na marginama ECM29, svoja su redovita godišnja zasjedanja održali Izvršni odbor i Odbor za financije Svjetskog saveza kristalografa (International Union of Crystallography, IUCr), kojima je prisustvovao i predsjednik IUCr-a Marvin Hackert. Zasjedali su u Rovinju i Izvršni odbor i Vijeće Europske kristalografske zajednice (European Crystallographic Association, ECA). Odlukom Vijeća ECA-e, na mjestu predsjednice te udruge, Alessia Bacchi zamijenila je dosadašnjeg predsjednika Andreea Roodta. Održan je i sastanak Programskog odbora ECM30, koji će se sljedeće godine održati u Baselu u organizaciji Švicarskog kristalografskog društva. Svoja godišnja zasjedanja je, u toku ECM29, održalo i svih 15 interesnih skupina koje djeluju unutar Europske kristalografske zajednice.



Slika 4 – Svečano otvorenje ECM29

Slika 5 – Prijem nakon svečanog otvorenja održan je u izlagačkoj dvorani AECC-a, gdje je, tijekom ECM29, na 1600 m<sup>2</sup> bila izložena naj-suvremenija kristalografska oprema

## Društveni program

Društveni program ECM29 počeo je u nedjelju, 23. 8. 2015. raskošnom ceremonijom svečanog otvaranja, koju je vodio urednik s Hrvatskog radija, gosp. Tomislav Šikić, dok je za umjetnički program angažirana klapa "Motovun". Svečanost je započela točno u 18:45 h projekcijom službenog promotivnog spota Hrvatske turističke zajednice "Oda radosti". Pred prepunom velikom dvoranom AECC-a, sudionicima i gostima ECM29 obratili su se redom: Aleksandar Višnjevac, predsjednik Organizacijskog odbora ECM29 i predsjednik HUK-a, Ružica Beljo-Lučić, pomoćnica ministra znanosti obrazovanja i sporta za visoko obrazovanje, Stanko Popović, predsjednik Hrvatske kristalografske zajednice (HKZ), te Andreas Roodt, predsjednik ECA-e. Svečanost je završila uručjenjem Perutzove nagrade ECA-e ovogodišnjem laureatu – Johnu Helliwellu sa Sveučilišta u Manchesteru, te njegovim predavanjem *Synchrotron radiation in crystallography: instrumentation, methods and applications*. Svečanost otvaranja ECM29, kao i predavanje profesora Helliwella, emitirani su uživo putem mrežnog prijenosa, a cjeloviti snimak je dostupan na društvenim mrežama Facebook\* i YouTube\*\*. Nakon službenog dijela svečanosti, sudionici su pozvani na cocktail dobrodošlice. Bogati društveni program na ECM29 nastavljen je u ponedjeljak, 24. 8. 2015. večernjom zabavom za mlade kristalografe na otvorenom, uz DJ-a i bogatu ugostiteljsku ponudu. Ovu zabavu, održanu u turističkom kompleksu Valdaliso, sponzorirao je Globtour Event d. o. o., službeni partner HUK-a za organizaciju ECM29. Iste večeri su, s početkom u 21:00 h, dijamantni partneri ECM29 – Bruker i Incoatec, te (s početkom u 20:30) Rigaku – platinasti partner ECM29, priredili večernje zabave za svoje goste – sudionike ECM29. Bogati program večernjih društvenih događanja za sudionike ECM29 nastavljen je u utorak, 25. 9. 2015. koncertom Brune Phillipa i kvarteta Rucner u crkvi rovinjskog franjevačkog samostana, pod nazivom *Music Ethno Box*. Svečana konferencijska večera, kojoj je prisustvovalo 354 sudionika ECM29, održana je u srijedu, 26. 9. 2015. u velikoj kongresnoj dvorani Hotela Lone. Uzvanici su, kako je to običaj na ECM-ovima, sami platili večeru. Jedan od najznačajnijih sponzora i partnera ECM29, *Panalytical*, odabrao je upravo ECM29 za dodjelu svoje Treće godišnje nagrade (za izniman znanstveni uspjeh tijekom 2014. godine) koja je dodijeljena Matteu Bianchiniju sa Sveučilišta u Amiensu na prigodnoj svečanosti održanoj 26. 9. 2015. u 19 h u hotelu Lone. Svečanost zatvaranja ECM29 održana je u velikoj

dvorani AECC-a u četvrtak, 27. 8. 2015. s početkom u 19:45 h, odmah nakon završetka drugog plenarnog predavanja. Svečanost je vodio Zoran Štefanić, urednik mrežnih stranica ECM29, a tijekom svečanosti uručeno je čak 20 nagrada za najbolje postere koje su u različitim kategorijama, većinom mladim znanstvenicima, dodijelili predstavnici 13 sponzora, među ostalima i Hrvatska udruga kristalografa (kotizacija za 3. Europsku kristalografsku školu koja će se u organizaciji HUK-a održati sljedećega rujna u Bolu na Braču). Grad Rovinj je, u dogovoru i na poticaj Organizacijskog odbora ECM29, sponzorirao dva turistička obilaska Rovinja za pratne osobe uz pratnju stručnog vodiča (25. 8. 2015. i 27. 8. 2015. u 10:00 h).



Slika 6 – Koncert za sudionike ECM29 održan je u crkvi franjevačkog samostana

Ured za odnose s javnošću IRB-a u suradnji s Organizacijskim odborom ECM29 objavio je dva priopćenja za medije s najavom održavanja ECM29 (6. 7. 2015. i 20. 8. 2015). Iako nije bilo akreditiranih predstavnika sredstava javnog priopćavanja na samome skupu, o njemu se u medijima govorilo u nekoliko prigoda tijekom rujna 2015. Emisije "Drag mi je Platon" Prvog programa Hrvatskog radija, "Znanstveni krugovi" Prvog programa Hrvatske televizije te "Znanost i društvo" Trećeg programa Hrvatskog radija objavile su priloge posvećene ECM29, u kojima su o samoj konferenciji, ali i o mogućnostima i aktualnom trenutku suvremene kristalografije govorili dr. Aleksandar Višnjevac, dr. Zoran Štefanić i dr. Vladimir Stilić.

\* [www.facebook.com/29thEuropeanCrystallographicMeeting](http://www.facebook.com/29thEuropeanCrystallographicMeeting)\*\* [www.youtube.com/watch?v=hdxTe8-dY4](http://www.youtube.com/watch?v=hdxTe8-dY4)



Slika 7 – Postersku nagradu Hrvatske udruge kristalografa, jednu od 20 dodijeljenih posterskih nagrada na ECM29, uručila je Marija Luić, dopredsjednica Programskog odbora ECM29

## Satelitski skupovi

Prije i poslije ECM29 održano je, u zajedničkoj organizaciji HUK-a i partnerskih institucija iz inozemstva, čak deset satelitskih znanstvenih skupova, tematski i organizacijski naslonjenih na ECM29, uz sudjelovanje ukupno 238 znanstvenika. Po broju održanih satelitskih skupova ECM29 je daleko najuspješniji europski kristalografski kongres ikada održan. Imajući ovo u vidu, jasno je da je Hrvatska udruga kristalografa, *de facto*, tijekom kolovoza 2015. uspješno provela organizaciju čak jedanaest, a ne samo jednog skupa.

Radionica *Advanced software development for crystallographers* održana je od 20. 8. 2015. do 22. 8. 2015. u Srednjoj školi "Zvane Črnje" u Rovinju, uz sudjelovanje 40 predavača i polaznika. HUK je, u znak zahvalnosti za gostoprimstvo, Školi poklonio meteorološku stanicu u vrijednosti 4.000,00 kn, te dogovorila znanstveno-popularni seminar na temu kristalografije i mineralogije, koji će, za učenicke i nastavnike ove škole, održati znanstvenici HUK-a početkom studenoga 2015. Ugostiteljske usluge za sudionike ove radionice ugovorene su s obližnjom Strukovnom školom Eugena Kumičića, čiji su učenici, pod nadzorom svojih nastavnika i uz vrhunske ugostiteljske standarde, priredili ručkove, večere i osvježenja u pauzama predavanja.

Sastanak Europske kristalografske mladeži (*European young crystallographers' satellite meeting*) održan je 23. 8. 2015. u Rovinju uz sudjelovanje 55 mladih kristalografa. Održano je jedno plenarno predavanje, 12 usmenih izlaganja, te predstavljeno 11 postera.

Radionica *Metadata for raw data from X-ray diffraction and other structural techniques* održana je u konferencijskoj dvorani Hotela Park u Rovinju, 22. 8. – 23. 8. 2015. uz izravni mrežni prijenos i sudjelovanje 19 znanstvenika. Sva predavanja održana u okviru ove radionice trajno su dostupna na YouTube kanalu IUCr-a.

U organizaciji HUK-a i Protein Data Bank in Europe (PDBe) održana je 22. 8. 2015. u maloj konferencijskoj dvorani Hotela Park u Rovinju jednodnevna radionica *Making the most out of PDB and EMD data*, uz sudjelovanje osam registriranih polaznika i dva predavača.

Iako je okupio samo pet polaznika, *OLEX2 Workshop*, održan u Hotelu Park, u nedjelju, 23. 8. 2015. predstavio je jedan od naj-

moćnijih računalnih programa za rješavanje kristalnih struktura malih molekula – OLEX2. Održavanjem te radionice, organizator Horst Puschmann uspio je nastaviti tradiciju s prethodnih europskih i svjetskih kristalografskih okupljanja.

*CCDC workshop* u organizaciji HUK-a i Cambridge Crystallographic Data Centre-a okupio je 26 polaznika, a na njemu je četvoro predavača predstavilo novitete iz radionice CCDC-a, prije svega nove mogućnosti najveće svjetske baze kristalografskih podataka – Cambridge Structural Database. Radionica je podijeljena u dvije poludnevne sekcije koje su održane u nedjelju, 23. 8. 2015 u Hotelu Lone u Rovinju.

Radionica *Fundamentals of Materials Analysis Using Powder Diffraction* održana je u nedjelju, 23. 8. 2015. u konferencijskoj dvorani Hotela Eden u Rovinju u organizaciji International Centre for Diffraction Data i Hrvatske udruge kristalografa. Sudjelovalo je 13 polaznika. Radionica je za temu imala identifikaciju novih materijala uz uporabu podataka dobivenih difrakcijom rendgenskih zraka na praškastim uzorcima.

*DIALS workshop* u organizaciji HUK-a i Diamond Light Sourcea održan je u nedjelju, 23. 8. 2015. u konferencijskoj dvorani Hotela Istra na Crvenom otoku, uz sudjelovanje 16 polaznika. Sudionicima je predstavljen DIALS (*Diffraction Integration for Advanced Light Sources*), novi programski paket za procesiranje rendgenskih podataka s makromolekulskih uzoraka. Osim prezentacija, polaznici su tijekom praktičnog (*hands-on*) dijela radionice dobili priliku i sami probati mogućnosti koje pruža taj novi programski paket.

28. 8. 2015. u Hotelu Lone u Rovinju održana je jednodnevna radionica *EosFIT*. 21 sudionik se upoznao s mogućnostima istomene programske podrške koji se rabi pri određivanju volumnih promjena na kristalima pod utjecajem temperature i tlaka tijekom difrakcijskog eksperimenta.

U Poreču je, od 28. do 31. 8. 2015., kao jedan od satelitskih skupova ECM29 održana *Škola elektronske kristalografije (ECS3)* u organizaciji Hrvatske udruge kristalografa i Sveučilišta Johannes Guttenberg u Mainzu. Tema ove škole, na dodirnici kristalografije i elektronske mikroskopije, privukla je 31 polaznika, koji su osim praćenja predavanja (ukupno devet predavača je sudjelovalo na Radionici) i aktivnog sudjelovanja na praktičnom dijelu nastave, imali prigodu i prikazati rezultate svojih istraživanja u toku posterske sekcije.



Slika 7 – Razgovori ugodni u pauzama predavanja na ECM29