

25. kongres Mezinárodní krystalografické unie (International Union of Crystallography IUCr) v Praze.

Hybridní kongres v době pandemie, srpen 2021

V polovině srpna se v Kongresovém centru Praha uskutečnil hybridní kongres Mezinárodní krystalografické unie – International Union of Crystallography (IUCr).

Krystalografie a kongres

Moderní krystalografie je obor zabývající se strukturou látek v atomové až nanometrické škále, primárně krystalovou strukturou a uspořádáním atomů v látkách. Zároveň se věnuje také studiu souvislostí struktury s vlastnostmi látek a metodám jejího určování, např. pomocí rozptylu rentgenového (rtg) záření, neutronů a elektronů. To zahrnuje i experimenty na velkých infrastrukturách jakými jsou synchrotrony, neutronové zdroje a další, což je spojené s vývojem a výrobou nákladných a unikátních zařízení. Jedná se o typicky interdisciplinární obor sahající od biologie – struktury biologických makromolekulárních látek, přes chemii – např. vývoj léčiv, chemické reakce až k fyzice a vývoji nových materiálů. Krystalografie a příslušné techniky nacházejí uplatnění i při studiu nerostných surovin (mineralogie), ale také v umění (symetrie, analýza uměleckých děl).

Obor více než 70 let zastřešuje IUCr a její regionální organizace. IUCr pořádá své kongresy spojené s valným shromážděním jednou za tři roky. V mezidobí se konají kongresy regionálních organizací. V České republice je nyní příslušnou organizací Krystalografická společnost (KS), která se souhlasem slovenské strany vystupuje navenek jako Česká a Slovenská. Registrována je v ČR. Vzhledem k široké interdisciplinaritě oboru, který celý neobsáhne žádná jednotlivá instituce (ústav, univerzita), se snahy o získání prestižního kongresu do Prahy ujala právě KS a po několika pokusech se nakonec v roce 2014 v Montrealu podařilo získat jubilejní 25. kongres v soutěži s Paříží na rok 2020. O tom rozhodlo víc než 80 delegátů valného shromáždění IUCr.

Historie Krystalografické společnosti i jejich předchůdců je velmi těsně spojena se skupinou rtg difrakce na MFF UK a to zejména od doby působení prof. Václava Valvody. V současnosti se tedy jedná o Katedru fyziky kondenzovaných látek, Oddělení strukturní analýzy.

Peripetie kongresu

V roce 2014 jsme tedy oslavovali vítězství, ale tehdy jsme vůbec netušili, co jsme vlastně vyhráli. Přípravy začaly dobře, hned po 24. kongresu v Hyderabadu v roce 2017. Během let 2017-18 byl sestaven mezinárodní programový výbor čítající 35 osob, převážně zástupců 22 odborných komisí IUCr. Tento výbor se sešel v Praze ve dnech 14.-16.5.2019. Při této příležitosti byl zorganizován workshop s názvem „Current Trends and Future of Crystallography“, kde zástupci všech komisí prezentovali současné problémy, moderní trendy i významné výsledky z příslušných oblastí. Během následujícího, velmi efektivního, dvoudenního jednání byla sestavena celá kostra programu kongresu zahrnující 3 plenární přednášky, 35 keynote přednášek, více než 100 standardních mikrosymposií a několik speciálních sekcí. V následujících měsících pak byl program finalizován. Vždy dva předsedající sekcí měli za úkol pozvat do sekce dva přednášející pro půlhodinové přednášky s tím, že další čtyři vyberou z přihlášených abstraktů. V únoru 2020 byl tento program prakticky kompletní.

Pak ovšem nastoupila první vlna pandemie a v půlce března na mimořádném online jednání výkonného výboru IUCr bylo rozhodnuto o odkladu kongresu na srpen 2021. V obsazeném kalendáři Kongresového centra Praha (KCP) byl volný pouze týden od 13.8.2021. Připravený program by zafixován a všichni jsme s napětím sledovali vývoj pandemie ve světě. Ten bohužel nevypadal vůbec dobře. V lednu 2021 jsme po krátké diskusi došli k závěru, že prostor pro další odklad kongresu z několika zásadních důvodů již není možný a je nutné ho nějakým způsobem uspořádat. Možnost uspořádání klasického prezenčního kongresu se jevila velmi nepravděpodobnou a nejjednodušší cestou jistě bylo udělat kongres čistě virtuální. Jenže o kongres jsme kvůli tomu určitě neusilovali a také nemalé množství lidí se do Prahy velmi těšilo. Jedinou možností bylo tedy nechat otevřenou možnost hybridního kongresu s kombinací reálné a distanční účasti. Začátkem února jsme v KCP shlédli demonstraci prezentačního systému gCon pražské firmy T.R.I., který v podstatě nezávisí na tom, kde jsou předsedající či přednášející. To nás přesvědčilo, že hybrid možný je a především, že rozhodnutí o formě lze učinit relativně pozdě. To ovšem vyžadovalo maximální flexibilitu všech stran, zejména KCP. V té době bylo zřejmé, že před červnem nebude možné toto rozhodnutí udělat prostě proto, že nikdo nic nebude vědět. Následovala komunikace se všemi předsedajícími a zvanými přednášejícími, tedy skoro 500 osobami s otázkou na jejich účast – dle možností reálnou či virtuální. Účast zrušilo méně než 10 procent z nich. Byla otevřena registrace pro virtuální účast s možností upgradu na reálnou a stále jsme sledovali vývoj covidových čísel. Situace ve druhé půlce května se zdála optimistická, byly zveřejněny očekávané podmínky pro hromadné akce v létě, dle opakovaných průzkumů mezi předregistrovanými se zdálo, že do Prahy může dorazit 700-800 lidí. Během června byl optimalizován a kompletován program přednášek. Otevřeli jsme reálnou registraci. Koronavirus se ovšem nevzdával, nasadil deltu a opět uzemnil naše naděje. Nicméně cesta zpět už nebyla. Poslední týdny před kongresem byly značně hektické. V podstatě to, co se obvykle připravuje 3-4 měsíce jsme dělali - 3-4 týdny. Vystavovatelé chtěli vědět, kolik lidí přijede reálně, my ovšem také, stejně jako účastníci. Barvy zemí na covidové mapě se měnily. Virus byl, zdá se, schopen rozlišovat i občanství, kdy jiné podmínky platily pro občany EU žijící v Anglii a jiné pro Angličany. Ti sem prostě nemohli. Sídlo IUCr je bohužel přitom právě tam. Nejistota byla enormní.

Hybridní kongres

Nakonec se ovšem kongres uskutečnil v podstatě tak, jak byl plánován. Hybridně a ve velmi příjemné atmosféře, a to i pro online účastníky, jak vyplývá z ohlasů níže, vesměs kladných. Podařilo se sestavit velmi kvalitní program. V tom je možnost online účasti velice pozitivním faktorem, protože pro zvané to může být neporovnatelně jednodušší. Jen málo oslovených odmítlo. Celkový počet registrovaných dosáhl 1700 a z toho méně než třetina dorazila do Prahy, docela často na kratší dobu s tím, že zbytku kongresu se účastnila online. Vzhledem k restrikcím bylo nejvíce zahraničních účastníků z Polska a Německa, ale přijeli i účastníci z Francie, Španělska, Švédska, Dánska, Finska, Chorvatska, Itálie, Rakouska, USA a dalších zemí.

Program

Program sestával ze tří plenárních přednášek, pěti přednášek spojených s udělením cen, 35 keynote přednášek, 103 standardních sekcí, sedmi speciálních mikrosymposií, softwarové sekce – vždy 9 sekcí paralelně, 55 posterových sekcí a několika komerčních prezentací. Celkem

bylo na kongresu předneseno 624 přednášek a představeno více než 500 posterových prezentací.

Letos byly navíc zařazeny i dvě sekce věnované strukturní biologii koronaviru a metodám boje s pandemií. V oblasti biologie dominovaly příspěvky strukturní biologie enzymů, ale výrazná byla i bioinformatika. S biokrystalografií byly spojeny i dvě přednášky nové ceny otce a syna Braggových pro mladé vědce – jedna věnovaná vakcíně proti malárii (Jean-Philippe Julien, Kanada), druhá proti Covid-19 (James Fraser, USA) a vlastně i jedna plenární přednáška související s příčinami Alzheimerovy choroby (David Eisenberg, USA). Hlavní – Ewaldova – cena a další plenární přednáška byly spojeny s daty a krystalografickými databázemi. Ewaldova cena byla udělena Olze Kennardové (Velká Británie) za vývoj Cambridgeské strukturní databáze organických látek a první plenární přednáška Heleny Bermanové (USA) byla zase převážně věnována proteinové databázi PDB.

Významným tématem celého kongresu byla tzv. elektronová krystalografie, tj. studium struktur pomocí elektronové difrakce, které bylo věnováno hned několik sekcí a do Prahy dorazilo i relativně hodně odborníků z této oblasti i proto, že největší doprovodnou školou byla právě škola o elektronové krystalografii, z větší části online, které se účastnilo skoro 200 lidí. V této oblasti se uděluje tzv. Gjønnesova cena, o kterou se podělili Sven Hovmöller (Švédsko) a Ute Kolb (Německo) a patřila k nim i keynote přednáška Lukáše Palatina z FZÚ AVČR v Praze.

Dalším výrazným tématem je tzv. kvantová krystalografie, věnující se např. studiu nábojových hustot. I z této oblasti dorazila do Prahy řada předních odborníků. Tématu bylo věnováno několik sekcí a keynote přednášek.

V materiálové oblasti dominovaly materiály používané pro ukládání energie, které se dnes často studují in-situ (např. i NMR, plenární přednáška Clare Grey, velmi obsazené sekce) nanomateriály, magnetické materiály. Velké množství příspěvků bylo přihlášeno do sekce komplexních struktur minerálů a anorganických materiálů i do sekce fázových přechodů v komplexních materiálech. Celkem nečekaně byla hodně obsazená sekce neuspořádaných materiálů. I přes relativně menší reklamu kongresu v tzv. chemické krystalografii bylo nejvíce účastníků právě z této oblasti – materiály důležité pro farmaceutický průmysl, metalo-organické materiály (MOF), katalýza. Dvě sekce byly rovněž věnovány aplikaci krystalografie při analýze uměleckých děl. Řada sekcí a keynote přednášek pak technikám jako neutronovému rozptylu, malouhlovému rozptylu, synchrotronovému záření, XAFS atd.

Jak fungoval hybridní kongres

Všechny prezentace byly spouštěny z lokálních serverů (detaily viz též www.tri.cz) a přednášející byli žádáni, aby do systému nahráli své prezentace (pptx, pdf) s předstihem, což ne všichni dodržovali a způsobovali pak, zejména v začátku kongresu, infarktové stavy technikům. Prezentace prošly technickou kontrolou, aby byl zajištěn jejich hladký průběh. Pokud byli přednášející během své přednášky připojeni online, měli potom plnou kontrolu nad prezentací a pohyb myši (ukazovátka) byl též přenášen. Vzdálení diváci měli možnost psát dotazy do listu „Questions“. Tyto dotazy byly viditelné pro všechny, zejména pro předsedající, kteří v diskusi pak z těchto dotazů vybírali. Pokud se na dotaz nedostalo, mohli je a stále mohou přednášející zodpovídat v části „Discussion“. Jako novinka byla zařazena i možnost vzdálených živých vstupů do diskuse po žádosti indikované ikonkou „zvednutí ruky“. Vstup povolovali předsedající a pro tazatele byla před tím poskytnuta možnost rychlotestu jejich mikrofonu a kamery.

Několik málo přednášejících dalo přednost možnosti nahrání kompletní prezentace jako videa ve formátu mp4. A to zejména v případě nevhodných časových posunů (např. západní pobřeží USA, Austrálie). Často ale tito přednášející byli k dispozici pro diskusi. Soubory prezentací zůstaly pro návštěvníky nedostupné, ale každý autor měl možnost nahrát do složky „Documents“ soubory bez omezení formátu a tyto soubory jsou dostupné ke stažení. Během kongresu se vyskytly všechny možné kombinace lokalizace přednášejících, dvou předsedajících i tazatelů a vždy vše fungovalo velmi dobře.



The Electric Field of ATP-Synthase



Quantum crystallography in materials science

17.08.2021 10:55

Terrace 2B

Tags: **PHYS**

Speakers:

Chérif F. Matta

Rating: ★★★★★

Info

Videorecord

Documents

Video

Discussions

Questions 2

This talk will underscore the importance of developing fast Quantum Crystallographic (QCr) [1] approaches to accurately calculate the electric fields and their associated electrostatic potentials of large molecules such as proteins. Crystallographic structures of ATP synthase from five species have been used to calculate (approximately) and compare their intrinsic electrostatic potentials and fields [2-4]. Striking consistent patterns (and differences) in the topographies of these scalar and vector fields are uncovered across the five studied ATP synthases [2]. The role of these fields in the biological function of ATP synthase will be discussed within the context of Mitchell's chemiosmotic theory. Our calculations suggest that, due to the intrinsic field of ATP synthase itself, the standard equation of chemiosmotic must be augmented by including a term that accounts for the

Stránka jedné přednášky – Info: abstrakt, Videorecord – záznam přednášky, Documents – dokumenty ke stažení, Video – video poskytnuté autorem ke stažení, Discussions – aktivní po celou dobu existence stránky, Questions – otázky, aktivní jen během přednášky a diskuse.

Všechny postery jsou k dispozici po celou dobu k náhledu i stažení. Bylo možné nahrát i prezentace pptx či pdf nebo i videa mp4, podle uvážení autorů. Novinkou v systému byly virtuální místnosti ke každému posteru, samozřejmě v omezeném čase dané sekce. Limit pro jednu místnost byl 25 osob a fungovaly podobně jako např. Zoom i s možností sdílené obrazovky. V hybridním módu bylo nezbytné časově oddělit tyto virtuální místnosti od reálných posterových sekcí. Kromě papírových posterů byly k dispozici také elektronické posterové tabule s možností vyhledávání a zobrazování detailů.

Rating: ☆☆☆☆☆



Info

Documents

Discussions

Virtual rooms



5fc-inh-1817620



javier-ellena-xxv-iucr-2021



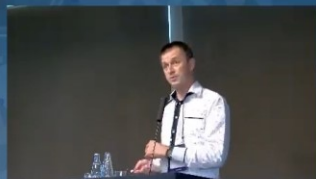
mechanochemical-synthesis-of-a-

Stránka posteru – Autor poskytl více stránek a navíc dokumenty. Virtuální místnost byla dostupná pouze během příslušné sekce

Veškeré materiály kongresu – videozáznamy přednášek, postery a další záznamy (schůze, koncerty) jsou nyní ke zhlédnutí všem registrovaným účastníkům až do konce listopadu (www.iucr25.org, iucr.gcon.me)

Všechny ohlasy jak lokálních, tak i vzdálených účastníků svědčí o tom, že kongres se vydařil snad po všech stránkách a předčil i očekávání, kdy řada účastníků byla k hybridní formě skeptická. Dokonce některé naznačují, že by se mohl stát i určitým vzorem těchto akcí. Je to zásluhou všech zúčastněných. Na výborném dojmu online účastníků má jistě zásadní podíl firma T.R.I. , jejich systém gCon a zodpovědný profesionální přístup. Zejména způsob jejich streamování se záběry přednášejících, předsedajících, tazatelů či sálů učinil z kongresu opravdu živou akci. Nemálo lidí si vychutnalo i přenášené koncerty. Prostě vzdálení účastníci byli zcela vtaženi do děje a ocenili vrcholnou profesionalitu. Níže jsou obrazovky zachycené z videí.

25th Congress of the International Union of Crystallography



Lukáš Palatinus

Hydrogens

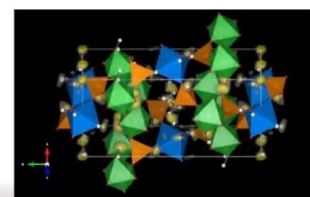
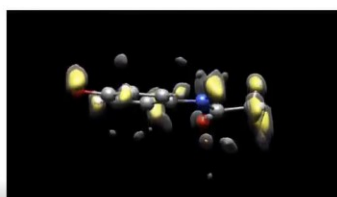
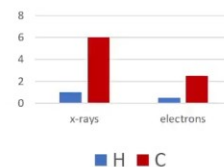
Hydrogens scatter relatively more in electrons than in x-rays.

Despite of that for a long time difficult to see.

Scattered mentions in literature before 2017 (Vainshtein et al., Palatinus et al., Rodriguez et al.)

The possibility demonstrated and analyzed in detail in 2017 by Palatinus et al. (2017)

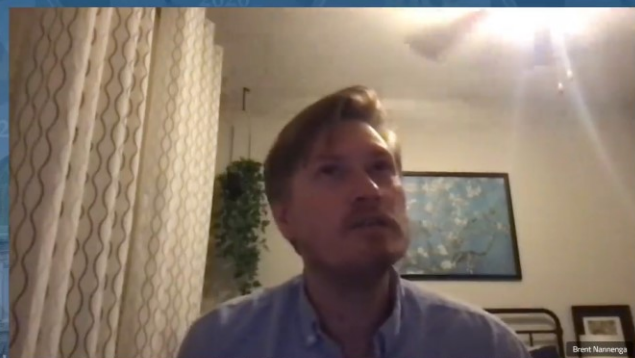
Now almost routine, although not always guaranteed.



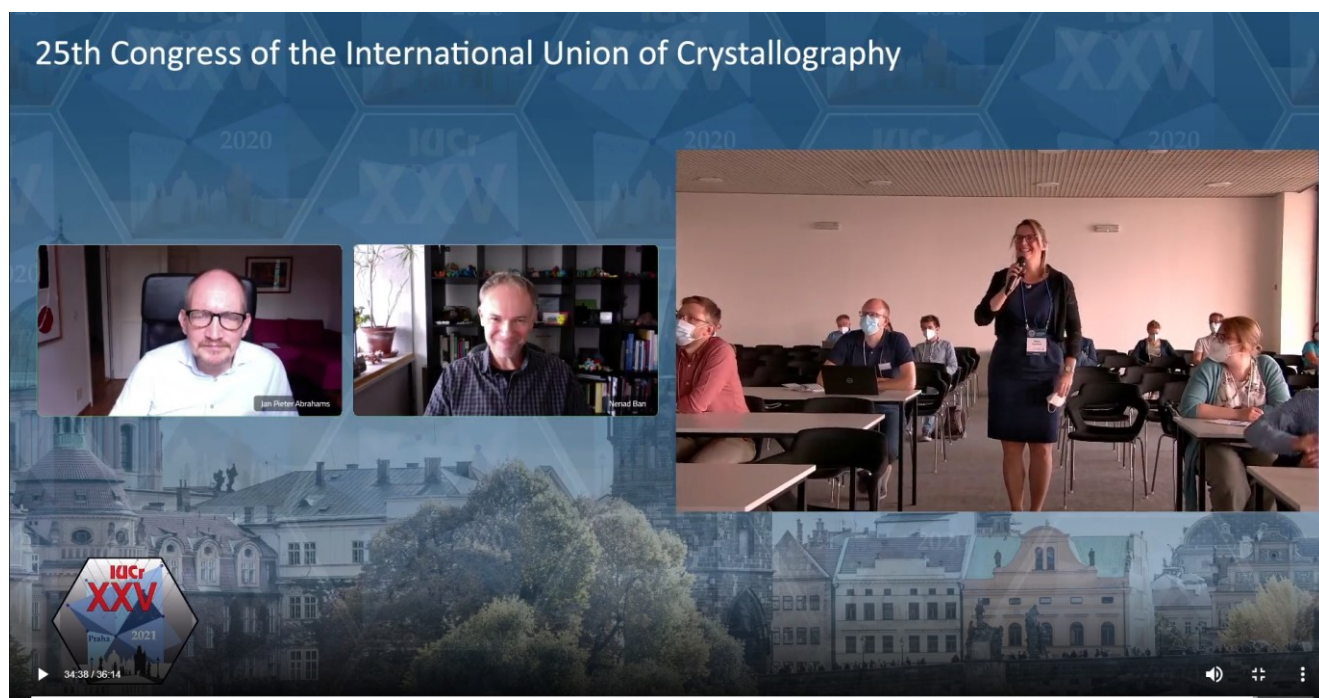
Vainshtein et al. in Electron Diffraction Techniques, vol. 1, I. M. Cowley, Ed. (1992); Palatinus et al. (2015), Acta Cryst. B; Rodriguez et al. (2015), Nature 525; Palatinus et al. (2017), Science 355

Typická obrazovka přednášky

25th Congress of the International Union of Crystallography



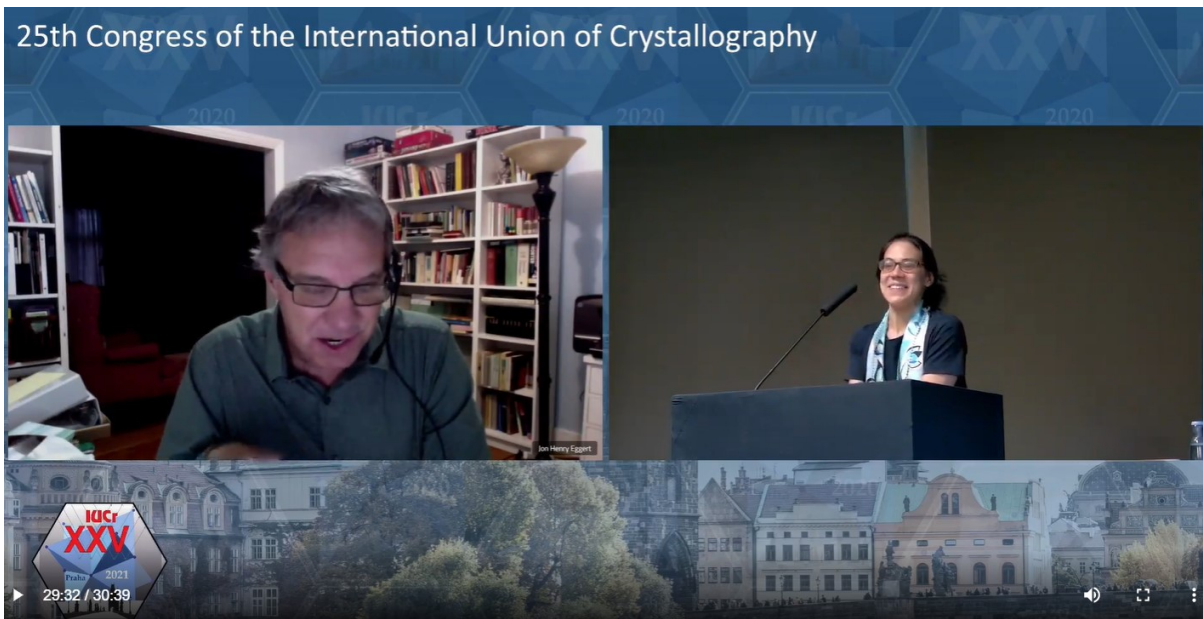
Vzdálený přednášející, místní posluchači



Vzdálený předsedající, přednášející, místní posluchači a tazatelka.



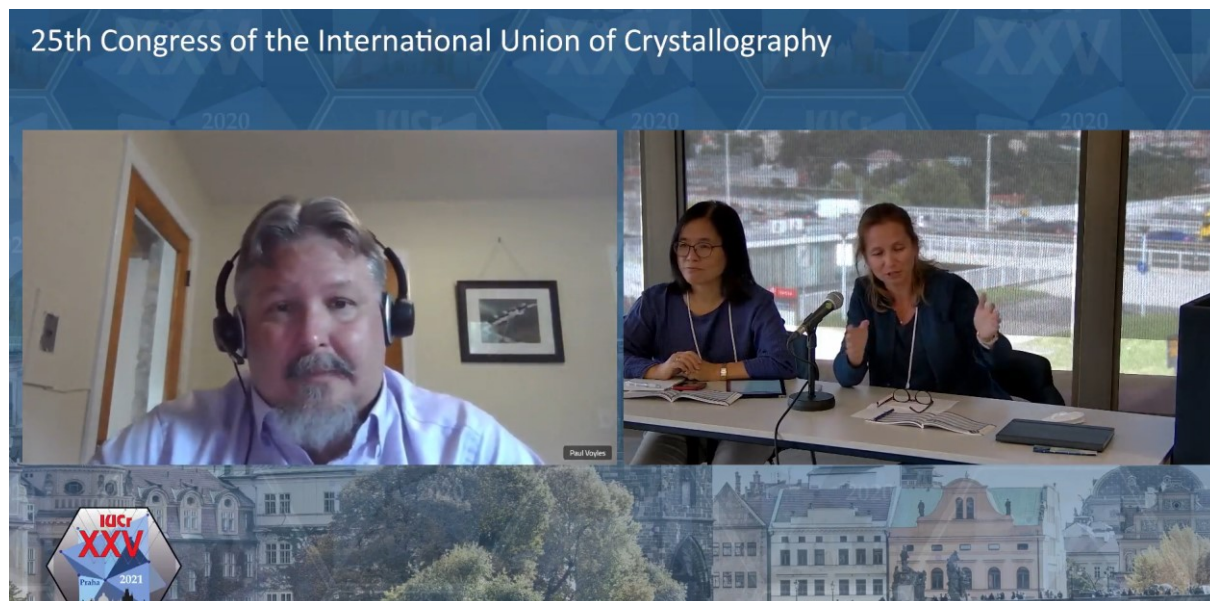
Vzdálení předsedající, přednášející, místní posluchači.



Vzdálený předsedající, místní přednášející (z USA).



Vzdálený předsedající, přednášející, místní předsedající.



Vzdálený přednášející, dva místní předsedající.



Vzdálený a místní předsedající. Přednášející byl na místě.

Poměrně dlouhá absence reálných akcí se projevila i v tom, jak vše pozitivně vnímali účastníci na místě, kteří si to užívali, i v přístupu KCP a cateringové firmy Zátíší. Všichni dělali maximum pro úspěch akce a na výsledku se to pozitivně projevilo. Samozřejmě nelze zapomenout na ty, kteří se výrazně podíleli na organizaci – Milan Dopita a další pracovníci a studenti KFKL, kolegové z ÚOCHB AV ČR (Pavlína Řezáčová, předsedkyně organizačního výboru), PřF JU (Ivana Kutá Smatanová, předsedkyně programového výboru), z Biotechnologického ústavu AV ČR a v neposlední řadě společnost Auletris (vedená Martinem Halounem) www.auletris.com. Velmi

se osvědčil registrační systém Conftool (<https://www.conftool.net/>) i prezentační systém gCon od T.R.I.

Kromě vědeckého programu proběhly i doprovodné akce – výlety lodí po Vltavě, večere s koncertem v Národním domě na Vinohradech a vlakový výlet do plzeňského pivovaru.

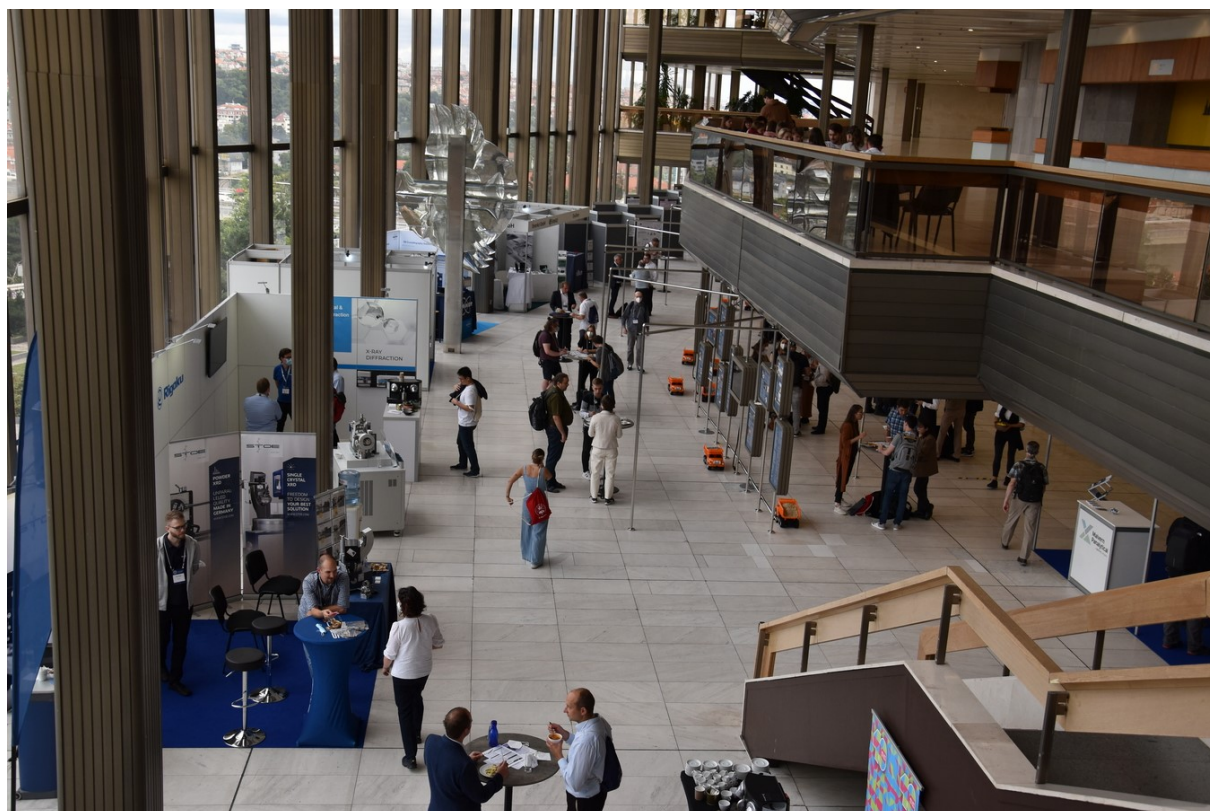
Více na www.iucr25.org.

Níže několik ohlasů.

Radek Kužel, předseda IUCr 25



Z koncertu Dvořákova kvarteta



Z výstavy



Část účastníků po závěrečném ceremoniálu.

Ohlasy

Dear Radek

Well now! The organization of the Congress was fantastic and everything including the remote presentations and interactions were perfect. I congratulate you and your team in achieving the seemingly impossible. This Congress will surely go down in everyone's memory as a very special success. I am lost in admiration for what you have been able to do.

Kind regards

Mike

Dear Radek, Pavlina, Ivana, and all Czech Friends,

What you have done with the 2020/21 IUCr Congress organization is beyond description. I am writing to express my highest appreciation and congratulations to you and your teams: you have overcome the impossible and organized an amazingly successful IUCr Congress. The organization was flawless but also the scientific content was magnificent. From my point of view (a very active on-line participant) everything worked perfectly; and the quality of the virtual environment was breathtaking. A quantum leap in the mastery of IUCr congress organization.

With my all best wishes,

Mariusz

Dear Radek,

Please allow me to hearty congratulate you and also your team for the organization of the wonderful IUCr Congress. You did an excellent job and organized a great conference.

As an on-line attendee I could fully enjoy the meeting. It is a huge advantage that the lectures will be available on-line for three more months. As you said in your closing remark, it is the start of a new era. I believe that the in person meetings are very important but from now on hybrid conferences and archiving the conference events are recognized and will be followed.

I both liked the lecturer and the chair functions of the gcon platform. The poster session was the best I have ever experienced.

All best wishes,

Petra

Dear Radek,

the congress is almost at the end. Since I will not be able to do this in person, let me send you my biggest and warmest congratulations for what you have achieved, it has been a splendid congress with an excellent program and a perfect organization. You and your colleagues have been fantastic.

Thank you so much for allowing us to gather in this novel mode, but with really common and joint spirits.

Alessia

Dear Radek and Ivana,

I had to leave the Congress early to join my family for a vacation. I just wanted to let you know that I think you have done a fantastic job organizing the Congress, especially under these difficult circumstances. Everything was great at all levels of organization, and I think the scientific quality of the meeting was very high. I have heard similar opinions from many other people. I think the Congress was definitely a success. Thank you for all your work!

*With best wishes,
Marcin*

Dear Radek, Ivana, Pavlina, and Martin,

Congratulations on successfully hosting such a wonderful congress. None could have managed the COVID situation better than you did. The content was top quality, and the opportunities to connect with colleagues were many. I spent the whole morning today working through continuing research-related email conversations started during the congress. I'll still look forward to watching recordings of some presentations that I missed. Your hybrid meeting platform will be a benchmark for future congresses. Thank you for so many years of effort to strengthen the union and to make Prague 2020 a great experience.

I wish you a speedy recovery from the long weeks of fatigue!

Branton

Dear Radek,

I would like to thank you and all the organizers for an unforgettable congress. Every IUCr congress stays in my mind as an inspiring and engaging experience from a scientific point of view. This time I would say that, looking at you and at your team, I learned from your example how it is possible to face unpredictable events and challenge them by exploring new paths without losing your smile and kindness. As a chair of a session I would like to acknowledge your support in all the phases of the difficult task of assembling the program and the support of the technical team during the session..

This IUCr congress was a remarkable event for me as a scientist and more important as a human being. I enjoyed every moment!

Grazie di cuore.

Consiglia

Dear Radek,

It was an amazing Congress and the job you and your teams (all of them) did is unprecedented! We all enjoyed Prague Congress even we were not there. You proved that it is possible to "do" a big, hybrid meeting, many others before you tried and failed. You, "The Prague" showed a new way. Frankly I prefer old way - but this IS the way of the future.

Hanna