



UNIwersytet JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

dr Marlena Gryl

**Inżynieria krystaliczna wydajnych materiałów optycznych
z wykorzystaniem metod krystalografii kwantowej oraz metod
projektowania *in silico***

Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych,
stanowiących znaczny wkład w rozwój dyscypliny

Kraków 2020

I. INFORMACJA O OSIĄGNIĘCIACH NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH, O KTÓRYCH MOWA W ART. 219 UST. 1. PKT 2 USTAWY

Osiągnięcie naukowe stanowi **11 publikacji naukowych** opublikowanych w latach **2013-2020** w recenzowanych czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym oraz **jeden rozdział w monografii** opublikowanej w roku 2018. We wszystkich zaprezentowanych w osiągnięciu publikacjach naukowych jestem autorem korespondencyjnym, z tego w ośmiu pracach jestem równocześnie pierwszym autorem.

Publikacje i monografie wchodzące w skład osiągnięcia:

IF _r	– współczynnik oddziaływania z roku publikacji
IF ₅	– średni pięcioletni współczynnik oddziaływania dla czasopisma
MNiSW	– liczba punktów przyznanych w roku publikacji
Cyt ^{WoS}	– liczba cytowań, według bazy Web of Science z dnia 05.07.2020
Cyt ^S	– liczba cytowań, według bazy Scopus z dnia 05.07.2020
*	– autor korespondencyjny

H1. M. Gryl*, M. Kozieł, K. Stadnicka, I. Matulková, I. Němec, N. Tesařová and P. Němec. **Lidocaine barbiturate: a promising material for second harmonic generation**, *CrystEngComm* (2013), 15, 3275-3278.

IF_r = 3,858; IF₅ = 3,172; MNiSW = 35; Cyt^{WoS} = 15; Cyt^S = 13

Udział własny: 70%

Opracowałam koncepcję badań i zaprojektowałam nowy materiał wieloskładnikowy. Otrzymałam monokryształy do badań rentgenowskich i badań optycznych. Wykonałam badania strukturalne oraz pomiary współczynników załamania światła. Zinterpretowałam wyniki badań nieliniowych właściwości optycznych. Przeprowadziłam obliczenia właściwości optycznych na poziomie cząsteczkowym, jak również dla struktury krystalicznej. Określiłam korelację struktura - własność fizyczna. Napisałam publikację, w której przygotowałam większość grafik, prowadziłam korespondencję z edytorem i opracowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H2. M. Gryl*, T. Seidler, K. Stadnicka, I. Matulková, I. Němec, N. Tesařová and P. Němec. **Crystal structure and optical properties of a pharmaceutical co-crystal - the case of melamine-barbital addition compound**, *CrystEngComm* (2014), 16, 5765-5768.

Publikacja w wydaniu specjalnym czasopisma dotyczącym kokryształów funkcjonalnych (**Special Issue on Functional Co-crystals**).

IF_r = 4,034; IF₅ = 3,172; MNiSW = 35; Cyt^{WoS} = 15 Cyt^S = 13

Udział własny: 70%

Opracowałam koncepcję pracy. Zaprojektowałam nowy materiał wieloskładnikowy, otrzymałam monokryształy do badań rentgenowskich i badań optycznych. Wykonałam badania strukturalne oraz pomiary współczynników załamania światła. Zinterpretowałam wyniki badań nieliniowych właściwości optycznych i wykonałam obliczenia właściwości optycznych na poziomie cząsteczkowym oraz dla struktury krystalicznej. Określiłam korelację struktura - własność fizyczna. Napisałam publikację, w której także wykonałam większość grafik. Prowadziłam korespondencję z edytorem i przygotowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów.



H3. M. Gryl*, S. Cenedese, K. Stadnicka. **Crystal Engineering and Charge Density Study of Pharmaceutical Non-linear Optical Material: Melamine-Barbital Co-Crystal.**, *Journal of Physical Chemistry C* (2015), 119(1), 590-598.

$IF_r = 4,509$; $IF_s = 4,537$; $MNiSW = 35$; $Cyt^{WoS} = 10$; $Cyt^S = 10$

Udział własny: 80%

Opracowałam koncepcję pracy, w tym sformułowałam nowe podejście do projektowania materiałów funkcjonalnych (połączenie krystalografii kwantowej, metod projektowania *in silico* z obliczeniami i pomiarami właściwości optycznych). Zaprojektowałam nowy materiał wieloskładnikowy, otrzymałam monokryształy do badań rentgenowskich oraz do badań optycznych. Przeprowadziłam analizę strukturalną, wykonałam obliczenia kwantowo-chemiczne, w tym badania rozkładu gęstości elektronowej dla kryształów (dane eksperymentalne oraz teoretyczne). Dokonałam korelacji pomiędzy strukturą, a własnościami fizycznymi. Napisałam publikację i wykonałam większość grafik. Prowadziłam korespondencję z edytorem i przygotowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H4. M. Gryl* **Charge Density & Optical Properties of Multicomponent Crystals Containing Active Pharmaceutical Ingredients or their Analogues, Feature Article** in *Acta Crystallogr.* (2015) B71, 392-405.

Publikacja na zaproszenie (*feature article*) wyróżniona statusem *open access* oraz okładką.

$IF_r = 2,892$; $IF_s = 4,656$; $MNiSW = 30$; $Cyt^{WoS} = 13$ $Cyt^S = 10$

Udział własny: 100%

Opracowałam koncepcję pracy, w szczególności innowacyjny pomysł na zastosowanie cząsteczek API do otrzymywania nowych wieloskładnikowych materiałów optycznych. Zaprojektowałam nowe materiały funkcjonalne. Wykonałam syntezę i otrzymałam monokryształy do badań rentgenowskich oraz badań optycznych. Wykonałam analizę strukturalną oraz badania rozkładu gęstości elektronowej, obliczenia właściwości optycznych na poziomie cząsteczkowym, jak również dla struktury krystalicznej. Wyprowadziłam korelację struktura - własność fizyczna. Napisałam publikację i wykonałam wszystkie grafiki. Prowadziłam korespondencję z edytorem i przygotowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H5. J. Wojnarska, M. Gryl*, T. Seidler, K. M. Stadnicka. **Crystal engineering, optical properties and electron density distribution of polar multicomponent materials containing sulfanilamide.** *CrystEngComm*, 2018, 20, 3638-3646.

$IF_r = 3,382$; $IF_s = 3,172$; $MNiSW = 35$; $Cyt^{WoS} = 6$ $Cyt^S = 4$

Publikacja została **wyróżniona na okładce czasopisma**.

Udział własny: 50%

Opracowałam koncepcję badań, wspólnie z doktorantką mgr J. Wojnarską (jestem promotorem pomocniczym w przewodzie doktorskim mgr J. Wojnarskiej) oraz z Prof. dr hab. K. Stadnicką (promotor pracy doktorskiej Pani mgr J. Wojnarskiej). Zaplanowałam i nadzorowałam wszystkie badania zaprezentowane w publikacji. Wykonałam pomiary współczynników załamania światła oraz dokonałam korelacji struktura – dwójłomność liniowa na podstawie obliczeń teoretycznych (dr T. Seidler) i badań eksperymentalnych. Uczestniczyłam w analizie słabych oddziaływań - obliczenia NCI (noncovalent interaction index) dla wyselekcjonowanych klastrów i badania metodą QTAIM. Brałam udział w analizie i interpretacji wszystkich otrzymanych wyników. Przygotowałam fragmenty tekstu publikacji oraz przeprowadziłam korektę całości manuskryptu. Przygotowałam i redagowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów. Kierowałam projektem naukowym (NCN sonata 8) obejmującym badania opisane w niniejszej pracy.



H6. M. Gryl*, M. Koziel and K.M. Stadnicka. A proposal for coherent nomenclature of multicomponent crystals. *Acta Crystallogr.* (2019). B75, 53-58. IF = 6.732

IF_r = 6,732; IF_s = 4,656; MNiSW = 140; Cyt^{WoS} = 4 Cyt^S = 4

Publikacja *open access*

Udział własny: 50%

Opracowałam koncepcję badań wspólnie z dr M. Koziel. Wykonałam pomiary rentgenowskie. Przeprowadziłam analizę strukturalną nowego kokryształu o specyficznym składzie, będącego podstawą do opracowania propozycji nowej nomenklatury dla materiałów wieloskładnikowych. Brałam udział w opracowaniu i testowaniu nowej nomenklatury. Przygotowałam manuskrypt i wykonałam większość grafik. Prowadziłam korespondencję z edytorem oraz dokonałam korekty manuskryptu, według zaleceń recenzentów. Kierowałam projektem naukowym (NCN sonata 8) obejmującym badania opisane w niniejszej pracy.

H7. M. Gryl*, A. Rydz, J. Wojnarska, A. Krawczuk, M. Koziel, T. Seidler, K. Ostrowska, M. Marzec and K.M. Stadnicka. Origin of chromic effects and crystal-to-crystal phase transition in the polymorphs of tyraminium violurate. *IUCrJ* (2019). 6, 226-237.

Publikacja *open access* została **wyróżniona na okładce czasopisma.**

IF_r = 4,756; IF_s = 5,434; MNiSW = 140; Cyt^{WoS} = 2 Cyt^S = 1

Udział własny: 50%

Opracowałam koncepcję badań. Wykonałam pomiary rentgenowskie dla monokryształów i przeprowadziłam analizę strukturalną dla badanych faz krystalicznych. Badania strukturalne nad fazami I i II oraz część badań optycznych zostało przeprowadzonych w ramach pracy magisterskiej, wykonanej pod moją opieką (mgr A. Rydz). Wykonałam pomiary współczynników załamania światła oraz dwójłomności liniowej dla wybranych faz krystalicznych. Nadzorowałam wszystkie badania stanowiące podstawę publikacji. Przygotowałam i redagowałam tekst manuskryptu. Określiłam korelację struktura – efekt chromowy z wykorzystaniem danych otrzymanych z pomiarów UV-Vis (wykonane przez mgr A. Rydz; jestem promotorem pomocniczym w przewodzie doktorskim mgr A. Rydz), badań rozkładu gęstości elektronowej (część obliczeń wykonana przez mgr J. Wojnarską), badań DSC (dr hab. M. Marzec), badań PXRD (dr M. Koziel) oraz obliczeń właściwości optycznych metodą QLFT (dr T. Seidler) i obliczeń polaryzowalności (dr A. Krawczuk). Prowadziłam korespondencję z edytorem oraz korygowałam manuskrypt według zaleceń recenzentów. Kierowałam projektem naukowym (NCN sonata 8) obejmującym badania opisane w niniejszej pracy.

H8. A. Rydz, M. Gryl*, K. Stadnicka, Solvomorphs of tyraminium 5,5-diethylbarbiturate: a rare example of the barbiturate R₃³(12) hydrogen-bond motif and a crystal structure with Z' = 4. *Acta Cryst. C* 74, (2018)1586-1594.

IF_r = 0,93; IF_s = 4,36; MNiSW = 15; Cyt^{WoS} = 0 Cyt^S = 0

Udział własny: 55%

Opracowałam koncepcję badań, zaprojektowałam zaprezentowane materiały wieloskładnikowe, otrzymałam monokryształy dla fazy jednoskośnej. Badania nad fazą heksagonalną były prowadzone pod moją opieką w ramach pracy magisterskiej (mgr A. Rydz). Wykonałam pomiary rentgenowskie, badania optyczne, uczestniczyłam w przeprowadzeniu analizy strukturalnej. Przeprowadziłam obliczenia i analizę słabych oddziaływań dla badanych faz w oparciu o metodę NCI (noncovalent interaction index). Brałam udział w pisaniu publikacji, opracowaniu grafik, przygotowaniu odpowiedzi na uwagi recenzentów i w korekcie manuskryptu według ich zaleceń. Kierowałam projektem naukowym (NCN sonata 8) obejmującym badania opisane w niniejszej pracy.



H9. M. Gryl*, T. Seidler, J. Wojnarska, K. Stadnicka, I. Matulková, I. Němec, P. Němec. **Co-Crystals of 2-Amino-5-Nitropyridine Barbitol with Extreme Birefringence and Large Second Harmonic Generation Effect.** *Chem. Eur. J.*, 2018, 24, 8727–8731.

$IF_r = 5,16$; $IF_5 = 4,843$; $MNiSW = 40$; $Cyt^{WoS} = 10$ $Cyt^S = 7$

Publikacja została wyróżniona na jednej z okładek czasopisma (*frontispiece*)

Udział własny: 70%

Opracowałam koncepcję badań. Zaprojektowałam i otrzymałam opisany, nowy materiał o wyróżniających się właściwościach optycznych z wykorzystaniem metod *in silico* oraz metod krystalografii kwantowej. Zaprojektowałam i przeprowadziłam wszystkie eksperymenty, począwszy od otrzymania materiałów, badań rentgenostrukturalnych, po pomiary współczynników załamania światła. Aktywnie uczestniczyłam w pomiarach SHG przeprowadzonych na Uniwersytecie Karola w Pradze. Wykonałam obliczenia i analizę słabych oddziaływań dla badanych faz w oparciu o metodę NCI (*noncovalent interaction index*). Określiłam korelację struktura własność w aspekcie otrzymanej ekstremalnej dwójłomności oraz wysokiej wydajności procesu generowania drugiej harmonicznej. Napisałam publikację, przygotowałam większość grafik. Prowadziłam korespondencję z edytorem i przygotowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów. Kierowałam projektem naukowym (NCN sonata 8) obejmującym badania opisane w niniejszej pracy.

H10. J. Wojnarska, M. Gryl*, T. Seidler, A. Rydz, M. Oszejca, K.M. Stadnicka, M. Marzec, I. Matulková, I. Němec, P. Němec. **Crystal Structure and (Non)linear Optical Properties of a Cyanuric Acid Isoniazid <1/1> Co-crystal: Shortcomings of Phase Matching Determination from Powdered Samples.** *Crystal Growth & Design* 2019, 19, 12, 6831-6836.

$IF_r = 4,153$; $IF_5 = 3,893$; $MNiSW = 100$; $Cyt^{WoS} = 0$ $Cyt^S = 0$

Udział własny: 50%

Opracowałam koncepcję pracy, Zaplanowałam i nadzorowałam wszystkie badania prezentowane w publikacji. Zanalizowałam i zinterpretowałam otrzymane wyniki, w szczególności wyniki pomiarów i obliczeń własności optycznych (SHG) w oparciu o dane uzyskane metodami PXRD oraz SEM. Wykonałam pomiary współczynników załamania światła oraz pomiary dwójłomności liniowej. Brałam udział w pisaniu publikacji, redagowałam całość tekstu. Przygotowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów, korygowałam końcową wersję manuskryptu według zaleceń recenzentów. Kierowałam projektem naukowym (NCN sonata 8) obejmującym badania opisane w niniejszej pracy.

H11. M. Gryl*, K. Ostrowska, J.E. Barquera-Lozada, K.M. Stadnicka. **Unveiling the Impact of Aggregation on Optical Anisotropy of Triazaacephenanthrylene Single Crystals – a Combined Quantum Crystallography and Conceptual DFT Approach.** *J. Phys. Chem. A* 2020, 124, 2931-2941.

$IF_r = 2,641$; $IF_5 = 2,634$; $MNiSW = 100$; $Cyt^{WoS} = 0$ $Cyt^S = 0$

Publikacja na zaproszenie do „Virtual Special Issue” z okazji 70-tych urodzin Prof. P. Geerlings’a z Vrije Universiteit Brussels (*Paul Geerlings Festschrift*).

Udział własny: 80%

Opracowałam koncepcję badań. Wykonałam pomiary rentgenowskie dla monokryształów oraz przeprowadziłam badania rozkładu gęstości elektronowej (dane teoretyczne oraz eksperymentalne). Wykonałam większość obliczeń zaprezentowanych w publikacji - z wyjątkiem obliczeń wskaźników aromatyczności, opartych o cyrkulację magnetycznie indukowanej gęstości prądu (dr J.E. Barquera-Lozada). Zanalizowałam wszystkie wyniki badań oraz dokonałam korelacji struktura - własność w aspekcie otrzymanej wysokiej dwójłomności, anizotropii absorpcji oraz fluorescencji. Napisałam publikację, w której przygotowałam większość grafik. Prowadziłam korespondencję z edytorem i sformułowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów. Obecnie kieruję projektem naukowym (NCN sonata bis 8) obejmującym badania opisane w niniejszej pracy.

H12 A. Krawczuk*, M. Gryl “Qualitative and quantitative crystal engineering of multi-functional co-crystals”– Chapter 3 (pp 60-95) w monografii Multi-Component Crystals: Synthesis, Concepts, Function, Ed. by Tiekink, Edward / Zukerman-Schpector, Julio, De Gruyter 2018. ISBN 978-3-11-046365-2.

Udział własny: 50%

Napisałam podrozdziały 3.2 oraz 3.3 dotyczące projektowania multifunkcyjnych kokryształów korzystając z metod jakościowych inżynierii krystalicznej – (metody *in silico*, analiza powierzchni Hirshfelda). Opracowałam także fragmenty podrozdziału 3.5 dotyczącego korelacji właściwości optycznych i struktury krystalicznej. Wybrałam część materiałów do badań, w tym kokryształy melaminy i barbitalu, polarne kokryształy kwasu p-hydroksybenzoesowego z benzotriazolem. Wykonałam obliczenia rozkładu gęstości elektronowej i analizę QTAIM dla dwóch odmian polimorficznych kokryształów kwasu p-hydroksybenzoesowego z benzotriazolem (podrozdział 3.5). Brałam udział w redakcji całości tekstu rozdziału oraz w przygotowaniu części odpowiedzi na uwagi recenzentów. Kierowałam projektem naukowym (NCN sonata 8) obejmującym badania opisane w niniejszej pracy.

II. INFORMACJA O AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ

1. Wykaz opublikowanych rozdziałów w monografiach naukowych:

A. Krawczuk*, **M. Gryl** “Qualitative and quantitative crystal engineering of multi-functional co-crystals”– Chapter 3 (pp 60-95) w monografii Multi-Component Crystals: Synthesis, Concepts, Function, Ed. by Tiekink, Edward / Zukerman-Schpector, Julio, De Gruyter 2018. ISBN 978-3-11-046365-2. (pozycja H12 w osiągnięciu naukowym)

2. Wykaz wszystkich opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych

Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora:

P30. (H11) M. Gryl*, K. Ostrowska, J.E. Barquera-Lozada, K.M. Stadnicka. Unveiling the Impact of Aggregation on Optical Anisotropy of Triazaacephenanthrylene Single Crystals – a Combined Quantum Crystallography and Conceptual DFT Approach. *J. Phys. Chem. A* 2020, 124, 2931-2941, IF_r = 2,641; IF₅ = 2,634.

P29. P. Szlachcic*, T. Uchacz, **M. Gryl**, A. Danel, K. Wojtasik, P. Kolek, B. Jarosz, K.M. Stadnicka, Combined XRD and DFT studies towards understanding the impact of intramolecular H-bonding on the reductive cyclization process in pyrazole derivatives. *J.Mol.Struct*, 1200 (2020) 127087. IF_r = 2,12; IF₅ = 1,861

P28. (H10) J. Wojnarska, M. Gryl*, T. Seidler, A. Rydz, M. Oszejca, K.M. Stadnicka, M. Marzec, I. Matulková, I. Němec, P. Němec. Crystal Structure and (Non)linear Optical Properties of a Cyanuric Acid Isoniazid <1/1> Co-crystal: Shortcomings of Phase Matching Determination from Powdered Samples. *Crystal Growth & Design* 2019, 19, 12, 6831-6836. IF_r = 4,153; IF₅ = 3,893

P27. J. Wojnarska, K. Ostrowska, **M. Gryl**, K. Stadnicka*. N-Tosyl-L-proline benzene hemisolvate: a rare example of a hydrogen-bonded carboxylic acid dimer with symmetrically disordered H atoms. *Acta*

Crystallogr. C, (2019). C75, 1228–1233. IF_r = 0,93; IF5 = 4,36

P26. (H6) M. Gryl*, M. Koziel and K.M. Stadnicka. A proposal for coherent nomenclature of multicomponent crystals. *Acta Crystallogr.* (2019). B75, 53-58. IF_r = 6,732; IF5 =4,656

P25. (H7) M. Gryl*, A. Rydz, J. Wojnarska, A. Krawczuk, M. Koziel, T. Seidler, K. Ostrowska, M. Marzec and K.M. Stadnicka Origin of chromic effects and crystal-to-crystal phase transition in the polymorphs of tyraminium violurate. *IUCrJ* (2019). 6, 226-237. IF_r = 4,756; IF5 =5,434

P24. (H8) A. Rydz, M. Gryl*, K. Stadnicka, Solvomorphs of tyraminium 5,5-diethylbarbiturate: a rare example of the barbiturate R₃³(12) hydrogen-bond motif and a crystal structure with Z' = 4. (2018). *Acta Crystallogr.* C74, 1586-1594. IF_r = 0.93; IF5 =4,36

P23. (H9) M. Gryl*, T. Seidler, J. Wojnarska, K. Stadnicka, I. Matulková, I. Němec, P. Němec. Co-Crystals of 2-Amino-5-Nitropyridine Barbitol with Extreme Birefringence and Large Second Harmonic Generation Effect. *Chemistry – A European Journal*, 2018, 24, 8727 –8731. IF_r = 5,16; IF5 =4,843

P22. A. González Guillén, M. Osajca, K. Luberd-Durnaś, **M. Gryl**, S. Bartkiewicz, A. Miniewicz, W. Lasocha*. Synthesis, Characterization, and Optical Properties of Organic–Inorganic Hybrid Layered Materials: A Solvent-Free Ligand-Controlled Dimensionality Approach Based on Metal Sulfates and Aromatic Diamines. *Cryst. Growth Des.* 2018, 18, 9, 5029-5037. IF_r = 4.153; IF5 = 3,893

P21. (H5) J. Wojnarska, M. Gryl*, T. Seidler, K.M. Stadnicka. Crystal engineering, optical properties and electron density distribution of polar multicomponent materials containing sulfanilamide. *CrystEngComm*, 2018, 20, 3638-3646. IF_r = 3,382; IF5 = 3,172

P20. L.M. Malec, **M. Gryl** and K.M. Stadnicka*. Unmasking the mechanism of structural para to ferroelectric phase transition in (NH₄)₂SO₄. *Inorganic Chemistry*, 2018, 57 (8), 4340–4351. IF_r = 4.850; IF5 = 4,559

P19. K. Ostrowska*, D. Ceresoli, K. Stadnicka, **M. Gryl***, M. Cazzaniga, R. Soave, B. Musielak, Ł.J. Witek, P. Goszczycki, J. Grolik, A.M. Turek. π-π Induced Aggregation and Single Crystal Fluorescence Anisotropy of 5,6,10b-Triazaacephenanthrylene., *IUCrJ*, 2018, 5, 335-347. IF_r = 4.756; IF5 = 5,434

P18. K. Ostrowska*, K. Stadnicka, **M. Gryl**, B. Musielak, Ł.J. Witek, O. Bocheńska. Synthesis, structure, and photophysical properties of luminescent zinc and cadmium complexes containing 2-pyridyl-substituted pyrrolo[2,3-b]quinoxaline, *Polyhedron* 2017, 133, 5, 294-301. IF_r = 2.067; IF5 = 1,890

P17. (H12) A. Krawczuk*, **M. Gryl** “Qualitative and quantitative crystal engineering of multi-functional co-crystals”– Chapter 3 (pp 60-95) w monografii Multi-Component Crystals: Synthesis, Concepts, Function, Ed. by Tiekink, Edward / Zukerman-Schpector, Julio, De Gruyter 2018. ISBN 978-3-11-046365-2

P16. A. Danel*, K. Wojtasik, P. Szlachcic*, **M. Gryl**, K. Stadnicka. A new regiospecific synthesis method of 1H-pyrazolo[3,4-b]quinoxalines – Potential materials for organic optoelectronic devices, and a revision of an old scheme. *Tetrahedron* 2017, 73, 34, 5072-5081. IF_r = 2.377; IF5 = 2,193

P15. A. Krawczuk*, **M. Gryl**, M. B. Pitak, and K. Stadnicka. Electron Density Distribution of Urea in

Co-crystals with Rigid and Flexible Dicarboxylic Acids., *Cryst. Growth Des.*, 2015, 15 (11), 5578–5592. IF_r = 4.425; IF₅ = 3,893

P14. K. Ostrowska*, B. Musielak, E. Szneler, Ł. Dudek, **M. Gryl**, and K. Stadnicka. Chelate Ring Size Effect as a Factor of Selective Fluorescent Recognition of Zn²⁺ Ions by Pyrrolo[2,3-b]quinoxaline with a Substituted 2-Pyridyl Group Receptor. *Inorganic Chemistry*, 2015, 54 (17), 8423-8435. IF_r = 4,820; IF₅ = 4,559

P13. (H4) M. Gryl* Charge Density & Optical Properties of Multicomponent Crystals Containing Active Pharmaceutical Ingredients or their Analogues, **Feature Article** in *Acta Crystallogr. B*, (2015) B71, 392-405. IF_r = 2.892; IF₅ = 4,656

P12. A. Kaźmierska, **M. Gryl**, K. Stadnicka, L. Sieroń, A. Eilmes, J. Nowak, M. Matković, M. Radić-Stojković, I. Piantanida, J. Eilmes*. Dicationic derivatives of dinaphthotetraaza[14]annulene: Synthesis, crystal structures and the preliminary evaluation of their DNA binding properties. *Tetrahedron* (2015), 71, 4163e4173. IF_r = 2,645; IF₅ = 2,193

P11. K. Ostrowska*, Ł. Dudek, J. Grolik, **M. Gryl** and K. Stadnicka. Pyrrolo[2,3-b]quinoxaline with 2-(2-aminoethyl)pyridine chain highly selective fluorescent receptor for Zn²⁺ exhibiting a dual fluorescence and AIEE in crystalline state. *CrystEngComm*, (2015), 17, 498-502. IF_r = 3.849; IF₅ = 3,172

P10. (H3) M. Gryl*, S. Cenedese, K. Stadnicka. Crystal Engineering and Charge Density Study of Pharmaceutical Non-linear Optical Material: Melamine-Barbital Co-Crystal., *Journal of Physical Chemistry C* (2015), 119 (1), 590-598. IF_r = 4.509; IF₅ = 4,656

P9. P. Szlachcic*, K.S. Danel*, **M. Gryl**, K. Stadnicka, Z. Usatenko, N. Nosidlak, G. Lewińska, J. Sanetra, W. Kuźnik. Organic light emitting diodes (OLED) based on helical structures containing 7-membered fused rings. *Dyes and Pigments*, (2015), 114, 184-195. IF_r = 4,055; IF₅ = 3,582

P8. (H2) M. Gryl*, T. Seidler, K. Stadnicka, I. Matulková, I. Němec, N. Tesařová and P. Němec. Crystal structure and optical properties of a pharmaceutical co-crystal - the case of melamine-barbital addition compound, *CrystEngComm*, (2014), 16, 5765-5768. **Special Issue on Functional Co-crystals.** IF_r = 4.034; IF₅ = 3,172

P7. A.S. Chimpri, **M. Gryl**, L.H.R. Dos Santos, A. Krawczuk, P. Macchi. Correlation between Accurate Electron Density and Linear Optical Properties in Amino Acid Derivatives: l-Histidinium Hydrogen Oxalate., *Crystal Growth & Design*, (2013), 13 2995-3010. IF = 4,558; IF₅ = 3,389

P6. (H1) M. Gryl*, M. Kozieł, K. Stadnicka, I. Matulková, I. Němec, N. Tesařová and P. Němec. Lidocaine barbiturate: a promising material for second harmonic generation, *CrystEngComm* (2013), 15, 3275-3278. IF_r = 3.858; IF₅ = 3,172

P5. A. Kaźmierska, **M. Gryl**, K. Stadnicka, J. Eilmes. New tetraaza[14]annulene receptors derived from 2,3-diaminonaphthalene: synthesis and crystal structures, *Supramolecular* (2013), 25(5), 276 – 285. IF_r = 2,132; IF₅ = 1,313

Przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora:

P4. M. Gryl*, A. Krawczuk-Pantula, K. Stadnicka. Charge-density analysis in polymorphs of urea-

barbituric acid co-crystals, *Acta Crystallogr.* (2011). B67, 144-154. IF_r = 2.286; IF₅ = 4,656

P3. M. Gryl*, K. Stadnicka. Rubidium 2,4,6-trioxo-1,3-diazinan-5-ide-1,3-diazinane-2,4,6-trione-water (1/1/1) *Acta Crystallogr.* (2011). E67, m571-m572. IF_r = 0.347; IF₅ = 0,278

P2. T. Seidler*, **M. Gryl**, B. Trzewik, K. Stadnicka. N-(5-nitropyridin-2-yl)-5H-dibenzo[d,f][1,3]diazepine-6-carboxamide, *Acta Crystallogr.* (2011) E67, o1507. IF_r = 0.347; IF₅ = 0,278

P1. M. Gryl, A. Krawczuk*, K. Stadnicka. Polymorphism of urea-barbituric acid co-crystals, *Acta Crystallogr.* (2008). B64, 623-632. IF_r = 2.286; IF₅ = 4,656

3. Wystąpienia na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych

Jestem współautorką **55 wystąpień konferencyjnych** w formie komunikatów **ustnych (15)** i **posterów (40)**. Spośród wszystkich wystąpień ustnych na konferencjach 10 prezentowałam osobiście. Ponadto zostałam zaproszona do wygłoszenia referatów ustnych na seminariach Wydziałowych (4) na Uniwersytetach w Bern (Szwajcaria), Aarhus (Dania), Namur, (Belgia) oraz na Uniwersytecie Karola w Pradze (Czechy).

Wystąpienia ustne na zaproszenie na konferencjach (po uzyskaniu stopnia doktora):

1. **1st International Electron Density Meeting**, Göttingen, Niemcy, 21-26.08.2019. **M. Gryl**, *Rational design of multicomponent functional materials using a combined statistical and quantum crystallography approach.*
2. **2nd European Symposium on Chemical Bonding**, 3-7.09.2018, Oviedo, Hiszpania **M. Gryl**, J. Wojnarska, A. Rydz, A. Krawczuk, T. Seidler *From electron density towards effective design of optical materials.*
3. **23th Congress and General Assembly of International Union of Crystallography**, 21-28.08.2017, Hyderabad, Indie **M. Gryl**, T. Seidler, J. Wojnarska *From molecules to materials – efficient crystal engineering of polar systems.*
4. **BIT's Annual Congress of Smart Materials-2016** **M. Gryl**, K. Stadnicka *Smart Materials for Nonlinear Optics: from betaine dyes to API based systems*, 2-7.03.2016, Singapur
5. **23th Congress and General Assembly of International Union of Crystallography** 5-12.08.2014, Montreal, Kanada **M. Gryl**, T. Seidler, K. Stadnicka *Charge density and Optical Properties of Multicomponent Materials containing APIs.*

Pozostałe wystąpienia ustne na konferencjach (po uzyskaniu stopnia doktora)

1. **31st European Crystallographic Meeting**, 22-27.08.2018, Oviedo (Hiszpania) **M. Gryl**, T. Seidler, A. Krawczuk, K. Ostrowska, K. Stadnicka *Cocrystallisation enhanced optical properties of organic materials – quantum crystallography meets crystal engineering*

2. **59th PTChem**, 19-23.09.2016, Poznań. **M.Gryl**, T.Seidler, “Smart materials for nonlinear optics: API based co-crystals” – wykład
3. **Erice School of Crystallography: Engineering Crystallography: From Molecule to Crystal to Functional Form**, 5-14.06.2015, Erice (Włochy) **M. Gryl**, *Charge Density Studies and Optical Properties of Melamine Barbitol Co-Crystal*
4. **54 Polish Crystallographic Meeting**, Wrocław. 5.07-7.07.2012. **M. Gryl**, M. Yamasaki, A. Yamano, K. Stadnicka, *Experimental electron density of Copper Barbiturate Trihydrate - a question of diffractometer choice* – lecture, (Zaproszenie od firmy Rigaku)
5. **European Charge Density Meeting - ECDM6**, 15-20.09. 2012 Štrbské Pleso, (Słowacja) **M. Gryl**, S. Cenedese, K. Stadnicka, *Charge Density Studies and Optical Properties of Melamine Barbitol Co-Crystal*.

Wykłady i seminaria na zaproszenie innych ośrodków naukowych (po uzyskaniu stopnia doktora)

- K1. *Rational design of multicomponent functional materials using a combined statistical and quantum crystallography approach* – Department of Inorganic Chemistry Faculty of Science, **Charles University, Praga**, 5.02.2020 – **wykład na Seminarium Wydziałowym**
- K2. *A Combined Experimental And Quantum Crystallography Approach Towards Obtaining Efficient Multicomponent Optical Materials* – **University of Namur**, Namur Institute of Structural Mater, department seminar, Namur, Belgium, 7.03.2019 – **wykład na Seminarium Wydziałowym**
- K3. *Smart Materials for Nonlinear Optics: from betaine dyes to API based systems* – Center for Materials Crystallography, Department of Chemistry and iNANO, **Aarhus University**, Denmark, 26.01.2015 – **wykład na Seminarium Wydziałowym**
- K4. *Crystal Engineering of Materials with Prospective Non-linear Optical Properties* – Department of Chemistry and Biochemistry, **University of Bern**, Switzerland, 21.10.2011– **wykład na Seminarium Wydziałowym**

Pozostałe wystąpienia (ustne oraz posterowe) na konferencjach krajowych i zagranicznych

po uzyskaniu stopnia doktora:

- K1. **Joint Polish-German Crystallographic Meeting 2020**, 24-27.02.2020, Wrocław (Polska)
Application of violuric acid as a possible optical sensor for basic amino acids detection – crystal structures and spectroscopic studies. A. Rydz, **M. Gryl**, K.M. Stadnicka – poster.
- K2. **32nd European Crystallographic Meeting**, 18-23.08.2019, Wiedeń (Austria)
 - J. Wojnarska, **M. Gryl**, T. Seidler, K. Stadnicka. *Assembly, crystal structures and (non)linear optical properties of multicomponent materials containing sulphonamides*. – poster

- Rydz, **M. Gryl**, A. Krawczuk, K.M. Stadnicka, *Understanding of chromic phenomena: the examples of violuric acid - amino acid based salts and co-crystals.* – poster
- K3. Tools for Chemical Bonding TCB-2019**, 14-19.07.2019, Bremen (Niemcy).
- Rydz, **M. Gryl**, A. Krawczuk, K.M. Stadnicka. *Revealing the source of color in the crystals of violuric acid with amino acids.* – poster
 - J. Wojnarska, **M. Gryl**, K.M. Stadnicka. *Polar vs centrosymmetric arrangement in concomitant polymorphs of 2-aminopyridinium sulfamethoxazole* – poster
- K4. 31st European Crystallographic Meeting**, 22-27.08.2018, Oviedo (Hiszpania); M. Koziel, K. Nowakowska, **M. Gryl**, D. Pinkowicz, W. Łasocha *Magnetic properties of highly symmetrical compounds of cobalt(II) and nickel(II)* - poster
- K5. 2nd European Symposium on Chemical Bonding** 3-7.09.2018, Oviedo (Hiszpania); J. Wojnarska, **M. Gryl**, T. Seidler, *Non-covalent interactions of polar cyanuric acid-isoniazid co-crystal with substantial NLO properties* - poster
- K6. 60 Polish Crystallographic Meeting**, 27-29.06.2018, Wrocław (Poland);
- J. Wojnarska, **M. Gryl**, T. Seidler, *Studies on optical properties and non-covalent interactions in sulfanilamide salts* –poster
 - M. Koziel, **M. Gryl**, *Proposal of new nomenclature for co-crystals and other multicomponent materials* –wykład;
 - A. González Guillén, K. Luberda-Durnaś, M. Oszejka, **M. Gryl**, S. Bartkiewicz, A. Miniewicz, W. Łasocha, *Synthesis, XRPD structure solution and optical properties of organic -inorganic hybrid layered materials: a solvent-free ligand-controlled dimensionality approach* –wykład;
 - L. Malec, M. Brela, **M. Gryl**, K. Stadnicka, *In silico studies of ammonium sulphate phase transition* – wykład;
 - A. Rydz, **M. Gryl**, J. Wojnarska, A. Krawczuk, T. Seidler, M. Koziel, K. Ostrowska, K. Stadnicka, *The origin of chromic effects in tyraminium violurate crystals* - poster
- K7. 24th Congress and General Assembly of International Union of Crystallography**, 21-28.08.2017, Hyderabad (Indie)
- J. Wojnarska, **M. Gryl**, T. Seidler, K. Stadnicka, *Charge density studies of multicomponent crystals containing sulphanilamide* – poster;
 - L.M. Malec, M.Z. Brela, **M. Gryl**, K.M. Stadnicka, *Ammonium Sulphate ferroelectric phase transition studied by ab initio calculations* – poster
- K8. Current Trends in Theoretical Chemistry VII**, 4-8.09.2016, Kraków (Polska);
- **M. Gryl**, T. Seidler, J. Wojnarska, I. Matulková, I. Němec, P. Němec, J. Kusz *Charge density and optical properties of api based co-crystals.* – poster;
 - J. Wojnarska, **M. Gryl** *Charge density studies in polymorphs of 2-amino-5-nitropyridine barbital co-crystal.* -poster

- K9. **1st European Symposium on Chemical Bonding**, 29.08-2.09.2016, Rouen, (Francja), **M. Gryl**, Quantitative crystal engineering techniques in the study of API based polymorphic co-crystals. – poster
- K10. **7th European Charge Density Meeting**, 26.06-1.07.2016, Warszawa (Polska); **M. Gryl**, T. Seidler *Crystal engineering and charge density studies of smart materials for nonlinear optics*. – poster
- K11. **58th Polish Crystallographic Meeting**, 22-24.06.2016, Wrocław (Polska); J. Wojnarska, **M. Gryl**, J. Kusz *Charge density studies of 2-amino-5-nitropyridine barbitol co-crystal*. – poster
- K12. **CE School on Physical Organic Chemistry "Movement in Chemistry"**, 06-10.06.2016 Wrocław-Przesieka, K. Ostrowska, B. Musielak, **M. Gryl**, K. Stadnicka. *E/Z Isomerization of N-Alkyl/Aryl Pyrroloquinoxaline Derivatives, Fluorescent Sensor for Metal Ions*.
- K13. **57th Polish Crystallographic Meeting**, 25-26.06.2015, Wrocław (Polska);
- **M. Gryl**, K. Stadnicka *Crystal Engineering of Optical Materials - From Molecular Properties of Barbiturates to Crystalline Materials* - poster;
 - M. Kozieł, **M. Gryl**, W. Łasocha *Nietypowe połączenie koordynacyjne $\{Zn_2(1,3pn)_6\}Cl_4$* – poster.
- K14. **Erice School of Crystallography: Engineering Crystallography: From Molecule to Crystal to Functional Form**, 5-14.06.2015, Erice (Włochy); **M. Gryl** *Crystal Engineering of Linear and Non-Linear Optical Materials - From Atomic and Molecular Properties to 3D Structural Architectures* –poster
- K15. **SagamoreXVIII** conference on Charge, Spin and Momentum Density, 7-12.06.2015, Sardinia, (Włochy); A. Krawczuk, **M. Gryl**, K. Stadnicka. *Role of urea molecule in co-crystals with dicarboxylic acids* – poster
- K16. **X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO X)**, 16-18.03.2015, Łódź (Polska) K. Ostrowska, B. Musielak, F. Iwańska, E. Szneler, **M. Gryl**, K. Stadnicka *Otrzymywanie i właściwości spektralne pochodnych pirolochinoksaliny i pirolopyrido-pirazyn, fluorescencyjnych receptorów jonów cynku*, K-35.
- K17. **21st International Symposium on the Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds (ISPPCC 2015)**, 5-9.07.2015, Kraków, P. Goszczycki, K. Ostrowska, K. Stadnicka, **M. Gryl**. *Unexpected pleochroism of zinc complex with N,N-bis(thiophen-2-ylmethyl)-3-aminopropyl group integrated with pyrrolo[2,3-b]quinoxaline* - poster
- K18. **23rd Congress and General Assembly of International Union of Crystallography**, 5-12.08.2014, Montreal (Kanada) T. Seidler, **M. Gryl**, B. Champagne, K. Stadnicka *Modeling of the Optical Properties of Organic Crystals*- poster
- K19. **Gordon Research Conference: Electron Distribution & Chemical Bonding**, 2-7.06.2013, Les Diablerets (Szwajcaria); **M. Gryl**, K. Stadnicka, M. Yamasaki, A. Yamano, F. White, Z. Gal *Experimental electron density of copper barbiturate trihydrate - a case study of diffractometer choice* – poster

- K20. **55th Polish Crystallographic Meeting**, 27-29.06.2013 Wrocław (Polska); M. Kozieł, **M. Gryl**, K. Stadnicka, W. Łasocha, *Porównanie metod wyznaczania struktury krystalicznej z danych dyfrakcyjnych różnego pochodzenia*, poster
- K21. **European Charge Density Meeting - ECDM-6**, 15-20.09.2012, Štrbské Pleso, (Słowacja)
- A.S. Chimpri, **M. Gryl**, P. Macchi *Electron Density Distribution of Metal-Biomolecule Frameworks (MBioFs)*. – poster;
 - T. Seidler, **M. Gryl**, K. Stadnicka *A Comparative Charge-Density and DFT Study of 2-Amino-5-Nitropyridine Derivatives* – poster
- Przed uzyskaniem stopnia doktora:**
- K22. **XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography**, 22-30.08.2011 Madryt (Hiszpania); **M. Gryl**, K. Stadnicka *Experimental and theoretical charge density studies of lidocaine barbiturate*” – Acta Cryst. A (2011) A67, C817.
- K23. **53rd Polish Crystallographic Meeting**, 30.06-1.07.2011, Wrocław (Polska); T. Seidler, **M. Gryl**, B. Trzewik, K. Stadnicka *Analiza strukturalna diazepaminy - rozważania teoretyczno-eksperymentalne*, poster
- K24. **26th European Crystallographic Meeting**, 30.08.2010-02.09.2010, Darmstadt (Niemcy); **M. Gryl**, A. Krawczuk, K. Stadnicka *Experimental charge density study and topological analysis for metal barbiturates*, Acta Cryst. (2010). A66, s286-s287.
- K25. **52nd Polish Crystallographic Meeting**, 24-26 VI 2010, Wrocław (Polska);
- B. Trzewik, **M. Gryl**, T. Seidler, E. Broclawik, K. Stadnicka *Wyniki rentgenowskiej analizy strukturalnej – koniec czy początek badań chemika organika*, wykład;
 - **M. Gryl**, B. Trzewik, K. Stadnicka *Wstępne badania eksperymentalnego rozkładu gęstości elektronowej w kryształach pochodnej benzodiazepaminy* – poster
- K26. **Gordon Research Conference: Electron Distribution & Chemical Bonding** 11-16.07.2010, Mount Holyoke College, MA (USA); **M. Gryl**, K. Stadnicka *Experimental charge density and electrostatic potential in the crystals containing barbituric acid* – poster
- K27. **25th European Crystallographic Meeting**, 16-21.08.2009, Istambul (Turcja); **M. Gryl**, K.M. Stadnicka *Crystal engineering of metal barbiturates as potential NLO materials*”, Acta Cryst. (2009). A65, s245.
- K28. **51st Polish Crystallographic Meeting**, 25-27.06. 2009, Wrocław (Polska); **M. Gryl**, A. Krawczuk, K. Stadnicka *Wstępne badania rozkładu gęstości elektronowej w kryształach monohydratu barbituranu kadmu* - poster
- K29. **XVI Kryształy Molekularne 8** - 12.09.2008, Poznań-Błażejewko (Polska); **M. Gryl**, K. Stadnicka *Inżynieria krystaliczna potencjalnych materiałów NLO z wykorzystaniem kwasu barbiturowego i jego pochodnych* - poster

- K30. **XXI Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography**, 23-31.08.2008 Osaka (Japonia); **M. Gryl**, A. Krawczuk, K. Stadnicka *Crystal engineering of materials with NLO properties using barbituric acid as a component* - Acta Cryst. (2008). A64, C487.
- K31. **50th Polish Crystallographic Meeting**, 26-28.06. 2008, Wrocław (Polska);
- Krawczuk, **M. Gryl**, K. Stadnicka *Badanie rozkładu deformacji gęstości elektronowej w odmianach polimorficznych adduktu kwasu barbiturowego*”, poster;
 - **M. Gryl**, A. Gębska, A. Stasiewicz-Urban, K. Stadnicka „Struktura krystaliczna merbitalu i jego tiopochodnych” – poster
- K32. **5th European Charge Density Meeting** (in conjunction with DFG 1178 annual meeting), 6-11.06.2008, Gravedona (Włochy) **M. Gryl**, A. Krawczuk, K. Stadnicka *Comparative charge density studies for polymorphs of barbituric acid urea addition compound* – poster
- K33. **49th Polish Crystallographic Meeting**, 29-30.06. 2007, Wrocław (Polska) **M. Gryl**, A. Janik, K. Stadnicka, *Struktura polarnych faz otrzymanych na drodze inżynierii krystalicznej z wykorzystaniem kwasu barbiturowego* – poster

4. **Udział w komitetach organizacyjnych naukowych konferencji międzynarodowych**

Członek Komitetu Organizacyjnego Konferencji 6th European Charge Density Meeting, 15-20.06.2012, Strbske Pleso, Słowacja

5. **Uczestnictwo w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych**

1. 2019-2023 Projekt **Sonata bis 8** (NCN) 2018/30/E/ST5/00638 “**Zastosowanie metod krystalografii kwantowej w projektowaniu nowych materiałów o wzmocnionych przez kokryształizację właściwościach optycznych**”, budżet projektu 1 092 100 zł, **kierownik projektu** – projekt bezpośrednio związany z osiągnięciem habilitacyjnym
2. 2015-2019 Projekt **Sonata 8** (NCN) 2014/15/D/ST5/02608 “Inżynieria krystaliczna materiałów optycznie liniowych i nieliniowych - od własności atomowych i cząsteczkowych do trójwymiarowej struktury krystalicznej”, budżet projektu 518 000 zł, **kierownik projektu** - projekt bezpośrednio związany z osiągnięciem habilitacyjnym – projekt zakończony
3. 2018-2020 Międzynarodowy **projekt polsko-belgijski** FRS-FNRS V4/125-«PAN(Polgne)-DeM-253» “Condensed phase effects on the polarizabilities of organic molecules and ions”, **wykonawca**
4. 2019-2021 Projekt **Preludium 15** (NCN) 2018/29/N/ST5/00634 “Engineering multicomponent optical materials containing sulfonyl derivatives using quantum crystallography methods”, **wykonawca**

5. 2018 "**Granty na granty: promocja jakości III**" – w związku z przygotowaniem wysoko ocenionego wniosku projektowego do programu badawczego Unii Europejskiej, kierownik projektu – projekt zakończony
6. 2009-2011 **Grant promotorski** Nr. N N204 316537, „Inżynieria krystaliczna materiałów o potencjalnych nieliniowych własnościach optycznych”, **główny wykonawca**, projekt zakończony
7. **Dotacja celowa** na działalność statutową **dla młodych naukowców** w latach 2012-13 w ramach Wydziałowego Funduszu Rozwoju Specjalności Naukowych (WFRSN) projekt „Inżynieria krystaliczna i strukturalna charakterystyka materiałów o określonych własnościach fizycznych, chemicznych, biologicznych” – numery decyzji WCh/SO/401/292/12, WCh/SO/401/209/13 – projekty zakończone
8. **Dotacja celowa** na działalność statutową **dla młodych naukowców** w roku 2014 w ramach Wydziałowego Funduszu Rozwoju Specjalności Naukowych (WFRSN) projekt „Inżynieria krystaliczna potencjalnych materiałów NLO w oparciu o pochodne betainy N-fenolopirydyniowej” numer decyzji: 406.3115.61.2015 – projekt zakończony

6. Członkostwo w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych

Jestem członkiem (individual member) Americal Chemical Society (ACS), European Crystallographic Association (ECA), oraz Polskiego Towarzystwa Krystalograficznego

7. Staże naukowe oraz szkolenia

1. Stypendystka **programu Bekkera** finansowanego przez Narodową Fundację Wymiany Akademickiej (NAWA) projekt „Wieloskładnikowe materiały optyczne - strategie projektowania, struktura, właściwości” realizowany we współpracy z Uniwersytetem Karola w Pradze, 4 miesięczny staż naukowy zaplanowany od 01.04.2020 – 31.07.2020. Z uwagi na pandemię wyjazd został przełożony na przełom 2020/2021.
2. **Wyjazdy szkoleniowe do Uniwersytetu Karola w Pradze** w ramach projektów Sonata 8 oraz Sonata bis 8: 17-20.05.2016; 3-7.02.2020.
3. **Wymiana bilateralna z Uniwersytetem w Namur**, Belgia, 14-18.08.2018; 4-8.03.2019
4. **Warsztaty** z krystalografii białek, Prot.XRD 12-16.07.2019
5. **Tutorial** Quantum Chemical Topology Tools in Chemical Bonding w ramach 2nd European Symposium on Chemical Bonding, 2-7.09.2018, Oviedo (Hiszpania)
6. **Tutorial** Topological Approaches (QTAIM, ELF, NCI) w ramach 1st European Symposium on Chemical Bonding, 27-28.08.2016, Rouen, (Francja)
7. **Erice School of Crystallography**: Engineering Crystallography: From Molecule to Crystal to Functional Form, 5-14.06.2015, Erice (Włochy)
8. Rigaku Oxford Diffraction/PTK CrysAllisPro **Workshop**, 25-26.06.2015 Wrocław, Polska

9. **International School on Charge Density** - Theory and Practice 30.08-4.09.2011, Jaca, Hiszpania
10. **Warsztaty** „Określanie chiralności struktur krystalicznych. Wyznaczanie struktury absolutnej.” podczas sesji Polskiego Towarzystwa Krystalograficznego, 27.06.2009, Wrocław, Polska

8. Informacja o recenzowanych pracach naukowych w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych

Od roku 2013 wykonałam łącznie **ponad 60 recenzji** dla czasopism o obiegu międzynarodowym w tym:

- RSC (CrystEngComm, RSC Advances),
- ACS (CrystGrowthDes, Journal of Physical Chemistry C),
- Nature (Scientific Reports),
- Wiley (ChemPhysChem),
- IUCr Journals (Acta Cryst.B; Acta Cryst C),
- Elsevier (Journal of Molecular Structure, Chemical Physics Letters),
- Springer (Applied Physics B)

9. Informacja o uczestnictwie w zespołach oceniających wnioski w konkursach mających charakter naukowy lub dydaktyczny

Członek Komisji Oceniającej prace w konkursie "Kryształy w życiu człowieka" organizowanym przez Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, European Chemistry Thematic Network Association (ECTNA) oraz Krakowski oddział Polskiego Towarzystwa Chemicznego w ramach Międzynarodowego Roku Krystalografii (2014).

III. INFORMACJA O WSPÓŁPRACY Z OTOCZENIEM SPOŁECZNYM I GOSPODARCZYM

1. Informacja o współpracy z sektorem gospodarczym

Promocja badań prowadzonych na Wydziale Chemii UJ:

Spotkanie branżowe „Nowe materiały na potrzeby przedsiębiorstw XXI wieku” zorganizowane przez CITTRU w Narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego SOLARIS w Krakowie 12.04.2018, podczas którego wygłosiłam prezentację: „Inżynieria krystaliczna materiałów optycznych nowe kierunki badań”

2. Uzyskane prawa własności przemysłowej, w tym uzyskane patenty, krajowe lub międzynarodowe

“Kokryształy 2-amino-5-nitropirydyny i barbitalu oraz sposób ich wytwarzania” numer patentu **P421574**, zgłoszony 2017-05-12, **zgłoszenie międzynarodowe PCT/PL2018/050020** z dnia

12.05.2018. Twórcy: M. Gryl (60% udziału w wynalazku), T. Seidler, J. Wojnarska.

3. Informacja o wykonanych ekspertyzach lub innych opracowaniach wykonanych na zamówienie instytucji publicznych lub przedsiębiorców

W roku 2009 wykonałam na zlecenie firmy Selvita badania naukowe objęte umową o poufności.

IV. INFORMACJE NAUKOMETRYCZNE (z dnia 5.07.2020)

Liczba wszystkich publikacji	29
Liczba publikacji naukowych stanowiących osiągnięcie habilitacyjne	11
Liczba rozdziałów w monografii	1
Liczba prac stanowiących osiągnięcie habilitacyjne	12
Liczba publikacji w WoS:	29
Patenty/zgłoszenia patentowe:	1
Sumaryczny IF _r	103,517
Sumaryczny IF ₅	100,807
Cytowania (bez autocytowań):	269(176)
Index Hirscha w bazie Web of Science	10

Podsumowanie publikacji naukowych stanowiących osiągnięcie habilitacyjne (H1-H11)

Sumaryczny IF _r	43,047
Sumaryczny IF ₅	44,529
Średni IF na publikację	4,142
Sumaryczna liczba cytowań	75
Sumaryczna liczba punktów MNiSW z roku publikacji	705

