

**Zakład Chemii Nieorganicznej i Strukturalnej  
Wydział Chemiczny  
Politechnika Wrocławska**

**SPRAWOZDANIE  
z grantu obliczeniowego za rok 2011**

**„Teoretyczne badania związków kompleksowych i metaloorganicznych,  
z zastosowaniem metod ab initio i DFT”.**

**Skład zespołu:**

- 1) prof. dr hab. inż. Danuta Michalska-Fąk,**
- 2) prof. dr hab. inż. Piotr Drożdżewski,**
- 3) dr Dariusz C. Bieńko,**
- 4) dr inż. Katarzyna Helios,**
- 5) dr inż. Piotr Wojciechowski,**
- 6) dr inż. Rafał Wysokiński,**
- 7) dr Wiktor Zierkiewicz.**

**Lista publikacji  
wykonanych z wykorzystaniem zasobów WCSS w roku 2011:**

- 1) W. Zierkiewicz, R. Wieczorek, P. Hobza, D. Michalska, "Halogen bonded complexes between volatile anaesthetics (chloroform, halothane, enflurane, isoflurane) and formaldehyde: A theoretical study" **Physical Chemistry Chemical Physics**, **2011**, 13, 5105-5113.
- 2) W. Zierkiewicz, B. Czarnik-Matuszewicz, D. Michalska, "Blue Shifts and Unusual Intensity Changes in the Infrared Spectra of the Enflurane...Acetone Complexes: Spectroscopic and Theoretical Studies", **Journal of Physical Chemistry A**, **2011**, 115, 11362-11368.
- 3) K. Helios, R. Wysokiński, A. Pietraszko, D. Michalska, "Vibrational spectra and reinvestigation of the crystal structure of a polymeric copper(II)–orotate complex,  $[\text{Cu}(\mu\text{-HOr})(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ : The performance of new DFT methods, M06 and M05-2X, in theoretical studies" **Vibrational Spectroscopy** **2011**, 55, 207-215.

- 4) P. Wojciechowski, K. Helios, D. Michalska "Theoretical anharmonic Raman and infrared spectra and vibrational assignments for monofluoroaniline isomers", **Vibrational Spectroscopy** **2011**, 57, 126-134.
- 5) K. Helios, A. Pietraszko, W. Zierkiewicz, H. Wójtowicz, D. Michalska, "The crystal structure, infrared, Raman and density functional studies of bis(2-aminophenyl) diselenide" **Polyhedron** **2011**, 30, 2466-2472.
- 6) K. Suracka, A. Bieńko, J. Mroziński, R. Kruszyński, D. Bieńko, A. Wojciechowska "A new molecular building blocks: Synthesis, crystal structure, magnetic and spectroscopic properties of Cu(II) and Ni(II) macrocyclic complexes", **Polyhedron** **2011**, 30 , 2550-2557.
- 7) H. Zasłona, P. Drożdżewski "X-ray structure and vibrational spectroscopy of cobalt(II) complex prepared with excess of 4-hydroxybenzhydrazide ligand", **Journal of Coordination Chemistry** **2011**, 64, 2262-2273.

### **Komunikaty konferencyjne:**

- 1) K. Helios, R. Wysokiński, W. Zierkiewicz, A. Pietraszko, D. Michalska „Metal-binding sites of Vitamin B<sub>13</sub>: structural, spectroscopic and theoretical studies” XI<sup>th</sup> International Conference on Molecular Spectroscopy, 17-21.09.2011, Kudowa Zdrój, (komunikat ustny).
- 2) K. Helios, R. Wysokiński, A. Pietraszko, D. Michalska, „Vibrational spectra and reinvestigation of the crystal structure of a polymeric copper(II)-orotate complex, [Cu(μ-HOr)(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sub>n</sub>” XI<sup>th</sup> International Conference on Molecular Spectroscopy, 17-21.09.2011, Kudowa Zdrój, (poster).
- 3) P. Wojciechowski, K. Helios, D. Michalska „Anharmonic Raman and infrared spectra of monofluoroaniline isomers” XI<sup>th</sup> International Conference on Molecular Spectroscopy, 17-21.09.2011, Kudowa Zdrój, (poster).

- 4) A. Bieńko, K. Suracka, J. Mroziński, R. Kruszyński, D. Bieńko " New heterometalic, ferromagnetic molecular nanomagnets of Ni(II) and Fe(III) XXIII, International Conference on Coordination and Bioinorganic Chemistry”, Smolenice, 5 - 10 June, 2011 (poster).
- 5) K. Suracka, A. Bieńko, J. Mroziński, R. Kruszyński, D. Bieńko "Synthesis, crystal structure and magnetic properties of New 2-D Cu(II) and Cr(III) heterobimetalic system XXIII, International Conference on Coordination and Bioinorganic Chemistry”, Smolenice, 5 - 10 June, 2011 (poster).

## **PRACA DOKTORSKA**

“Syntezy, struktury i widma oscylacyjne kompleksów hydrazynu kwasu 4-hydroksybenzoesowego z wybranymi metalami d–elektronowymi” – mgr inż. Halina Zasłona, promotor prof. Piotr Drożdżewski. Praca doktorska zakończona obroną w dniu 15 lipca 2011 i nadaniem przez Radę Wydziału Chemicznego P.Wr. stopnia *Doktora Nauk Chemicznych* w dniu 21 września 2011 roku.

## **PRACE MAGISTERSKIE**

„Widma w podczerwieni i Ramana związków kompleksowych wapnia(II) z kwasem orotowym i 5-aminoorotowym” – mgr inż. Anna Kołczyk, promotor dr inż. Katarzyna Helios.

„Synteza i widma oscylacyjne pikoplatyny (ZD0473) – nowego leku przeciwnowotworowego” – mgr inż. Magda Malik, promotor prof. dr hab. inż. Danuta Michalska-Fąk.

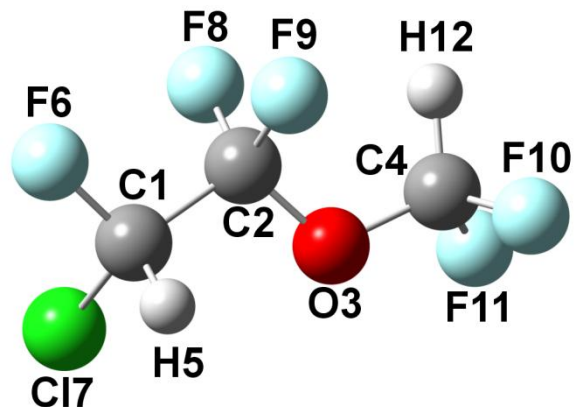
„Modelowanie struktury i właściwości spektroskopowych kompleksu kwasu pikolinowego z kationem oksowanadu(IV)” - mgr inż. Przemysław Janusz, promotor dr Dariusz Bieńko.

**Blue Shifts and Unusual Intensity Changes in the Infrared  
Spectra of the Enflurane...Acetone Complexes:  
Spectroscopic and Theoretical Studies**

Wiktor Zierkiewicz, Bogusława Czarnik-Matusiewicz, Danuta Michalska

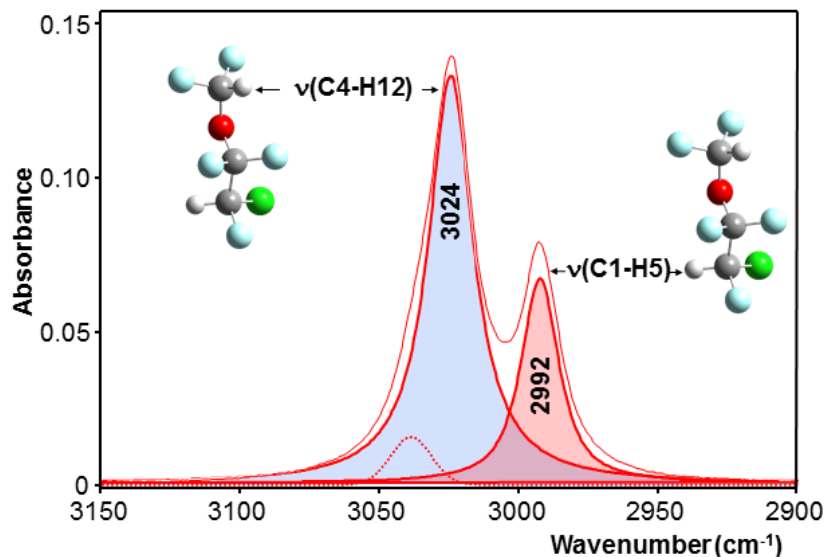
Journal of Physical Chemistry A, **2011**, 115, 11362





Efekty towarzyszące powstaniu wiązania wodorowego typu „red-shifting”:

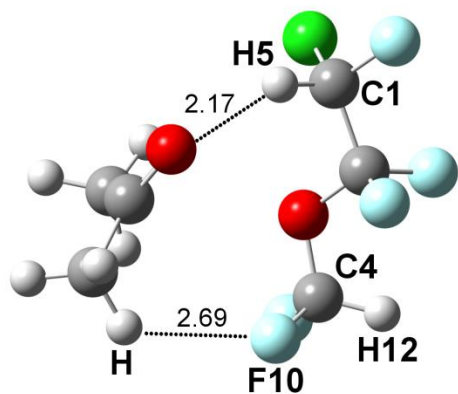
- 1) wydłużenie wiązania X-H,
- 2) obniżenie częstości drgania rozciągającego X-H (red shift),
- 3) znaczny wzrost intensywności pasma w IR związanego z drganiem rozciągającym X-H.



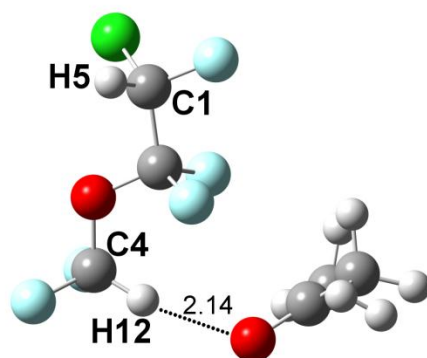
Efekty towarzyszące powstaniu wiązania wodorowego typu „blue-shifting”:

- 1) skrócenie wiązania X-H,
- 2) wzrost częstości drgania rozciągającego X-H (blue shift),
- 3) zmniejszenie intensywności pasma w IR związanego z drganiem rozciągającym X-H.

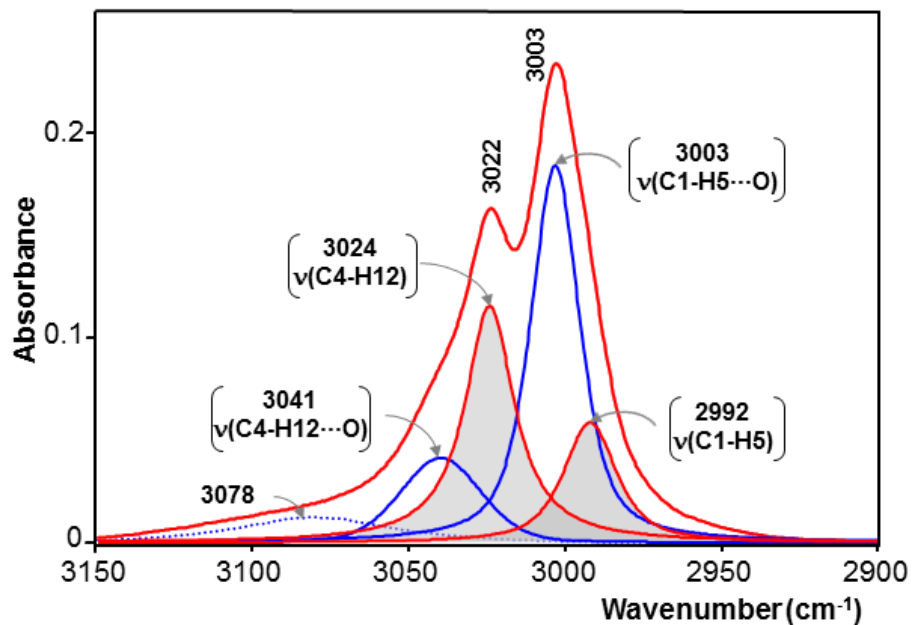
ENF-Ac (A)



ENF-Ac (B)



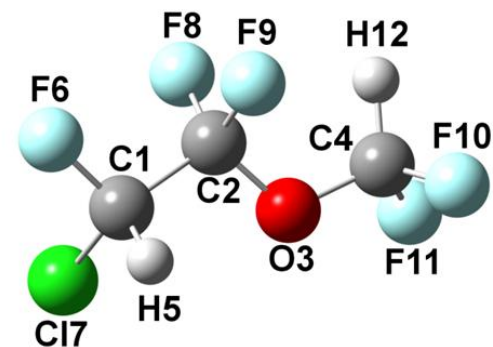
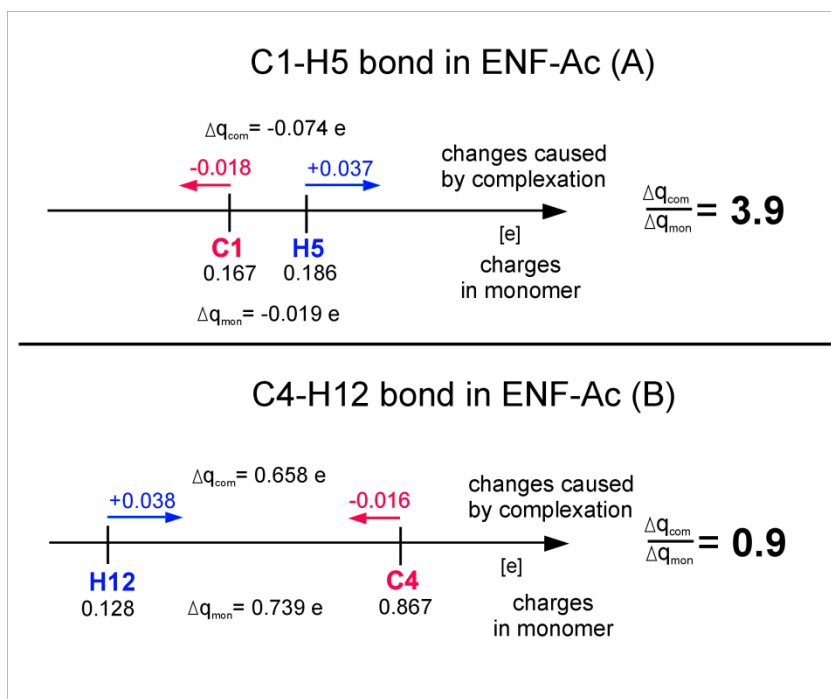
Kompleksy pomiędzy enfluranem a acetonem połączone wiązaniem wodorowym typu „blue-shifting” C-H...O. Poziom obliczeń MP2/6-311++G(d,p).



W przypadku dwóch drgań rozciągających  $\nu(\text{C-H})$  enfluranu zaobserwowano „blue shift” (o +17 and +11  $\text{cm}^{-1}$ ).

W wyniku tworzenia się wiązań wodorowych intensywności tych dwóch pasm ulegają przeciwnym zmianom. Intensywność jednego pasma maleje a drugiego znacznie wzrasta.

Ładunki na atomach węgla C1 i C4 oraz wodoru H5 i H12 w izolowanym enfluranie oraz ich zmiany wywołane kompleksowaniem z acetonem.



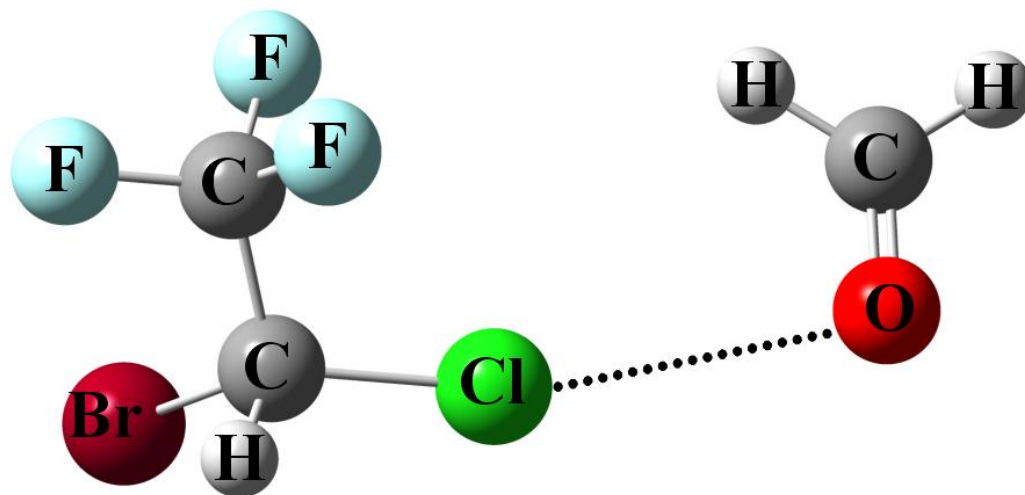
W wyniku kompleksowania z acetonem polarność wiązania C1-H5 wzrasta (wzrost intensywności), podczas gdy polarność wiązania C4-H12 maleje (intensywność maleje).

**Halogen Bonded Complexes Between Volatile Anaesthetics  
(Chloroform, Halothane, Enflurane, Isoflurane) and  
Formaldehyde: Theoretical Study**

Zierkiewicz W., Wieczorek R., Hobza, P., Michalska, D.

Physical Chemistry Chemical Physics, **2011**, 13 (11), pp. 5105-5113

## kompleks halotanu z formaldehydem

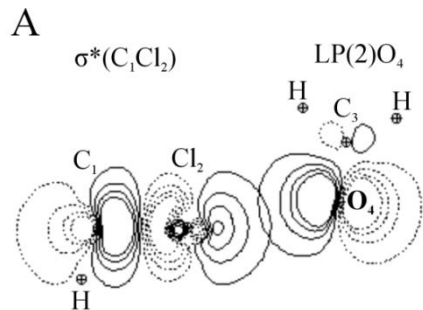


Energie stabilizacji kompleksów: chloroformu, halotanu, enfluranu i izofluranu z formaldehydem policzone na poziomie CCSD(T)/CBS wyniosły od -4.21 do -2.83 kcal/mol.

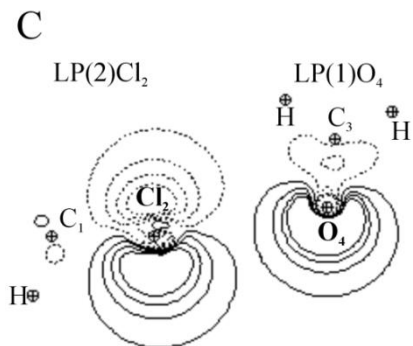
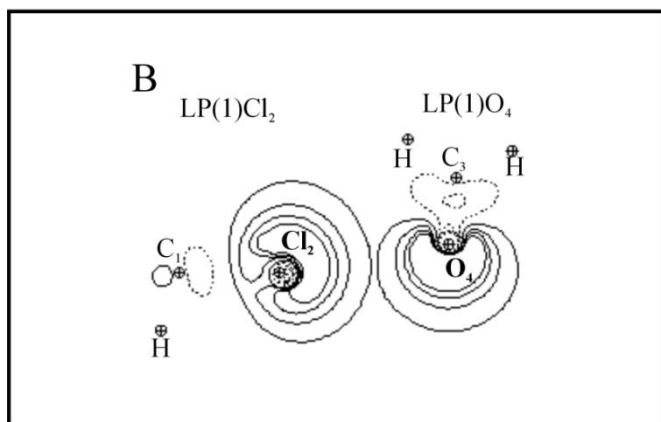
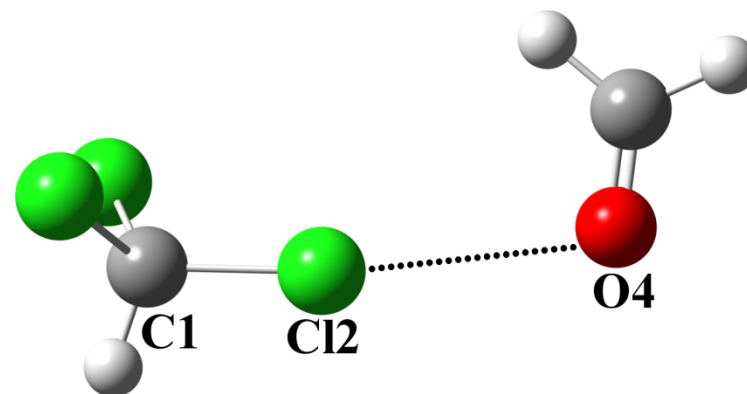
We wszystkich przypadkach zaobserwowano skrócenie wiązania C-X (X=Cl, Br) wywołane kompleksowaniem.

Jaka jest przyczyna skrócenia wiązania C-X ?

Przyczyną skrócenia wiązania C-X jest odpychanie pomiędzy wolnymi parami elektronowymi tlenu oraz atomu chloru lub bromu.



kompleks chloroformu z formaldehydem



Kontury wybranych orbitali atomowych na płaszczyźnie przechodzącej przez atomy: C1, Cl2 i O4.