

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie

Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky

Oddelenie fyzikálnej chémie

**Projekt podpory vedeckých pobytov na ILL (Grenoble, Francúzsko)
a na univerzite v Augsburgu (SRN) pre uchádzačov pôsobiacich na
FCHPT STU v Bratislave.**

**Experimentálne a teoretické štúdium elektrónovej štruktúry
komplexov 3d prechodných prvkov**

Názov projektu:

Projekt podpory vedeckých pobytov na ILL (Grenoble, Francúzsko) a na univerzite v Augsburgu (SRN) pre uchádzačov pôsobiacich na FCHPT STU v Bratislave.

Experimentálne a teoretické štúdium elektrónovej štruktúry komplexov 3d prechodných prvkov

Cieľ projektu:

Vyškolenie sa pracovníka v neutrónovej monokryštálovej štruktúrnej analýzy, získanie dát pre konkrétnu zlúčeninu, ich vyhodnotenie

Doba riešenia: 3.3.2010 - 30.9.2010

Požadovaná dotácia:

16 210,- €

Etapy:

I. etapa, 03.03.2010 - 30.04.2010

Prípravná fáza - oboznámenie sa s pracoviskom, prístrojovým vybavením, príprava vzoriek, testačné merania a úvodné výpočty

II. etapa, 16.06.2010 - 30.09.2010

Hlavná fáza - experiment v FRM-II (Mníchov, Nemecko), spracovanie dát z
neutrónového zdroja, výpočty elektrónovej štruktúry z rtg. dát,
príprava publikácie

Priebeh projektu:

I. etapa, 03.03.2010 - 30.04.2010

- oboznámenie sa s pracoviskom na univerzite v Augsburgu
- testačné meranie kryštálov Ni(II) komplexu Schiffovej bázy (*S*)-*N*-pentametylbenzylprolín (2-benzoylfenyl)amidu a (*S*)-alanínu (ďalej **PMAK**)
- difrakčný experiment pre PMAK na difraktometri APEX II Quazar
- predbežné vyhodnotenie získaných dát
- úvodné pokusy s prípravou vzorky pre neutrónovú difrakciu

II. etapa, 16.06.2010 - 30.09.2010

- pokračovanie s prípravou vzorky
- experiment v FRM-II v Mníchove
- pokračovanie vyhodnocovania dát
- prípravy na publikovanie výsledkov

Výsledky a nadväzujúce aktivity:

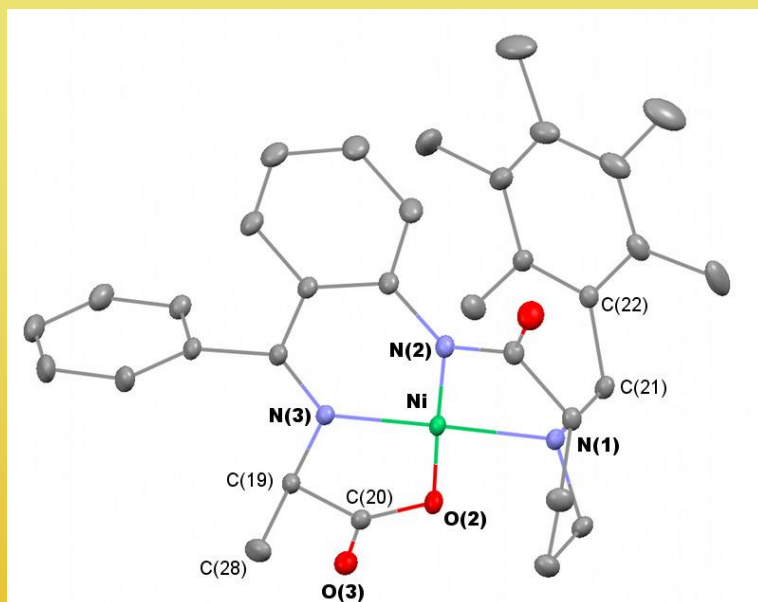
- 1 - 2 publikácie v CC časopisoch
- vyhodnotenie ďalších získaných dát
- experimenty v ILL v Grenobli (experiment č. 5-11-375 od 25.11.2010 do 3.12.2010)

Elektrónová štruktúra Ni(II) komplexu Schiffovej bázy (*S*)-*N*-pentametylbenzylprolín (2-benzoylfenyl)amidu a (*S*)-alanínu (PMAK)

Komplexy Ni(II) s Schiffovými bázami substituovaného (*S*)-*N*-benzylprolín (2-benzoylfenyl)amidu a α -aminokyselín sú sľubnými syntónmi α -aminokyselín, ktoré sú používané pri príprave rádiofarmák značkových izotopmi ^{11}C a ^{18}F používaných najmä v onkológií a neurológií.

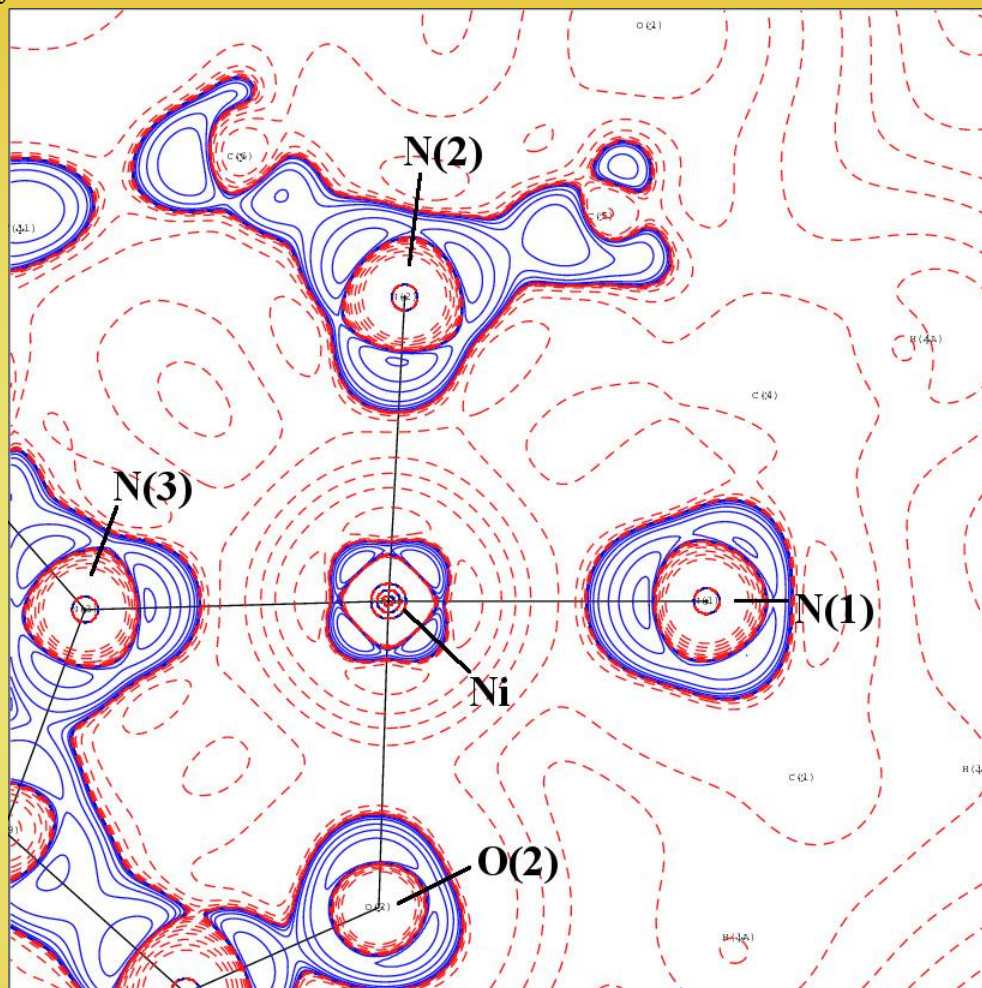
Metódou štúdia distribúcie elektrónovej hustoty bola študovaný komplex Ni(II) komplexu Schiffovej bázy (*S*)-*N*-pentametylbenzylprolín (2-benzoylfenyl)amidu a (*S*)-alanínu. V rámci doterajšieho výskumu, bola preukázaná vysoká stereoselektivita ^{13}C -metylácie tohoto komplexu a stereospecifická metylácia zodpovedajúceho komplexu odvodeného od glycínu [1].

Intenzívny výskum chémie doteraz syntetizovaných metalokomplexov syntónov aminokyselín nám umožňuje pokračovať v príprave ďalších zlúčenín tohoto radu s požadovanými vlastnosťami, vrátane komplexu PMAK [2,3].



Obr. 1 ORTEP reprezentácia štruktúry komplexu PMAK

Experimentálne dáta boli získané na difraktometri APEX II Quazar firmy Bruker vybavenom SMART APEX II CCD detektorm, spolu s nízko teplotným zariadením firmy Oxford Cryostream . Experiment bol vykonaný pri teplote 100 K. Distribúcia elektrónovej hustoty bola spresňovaná programovým balíkom XD.



Obr. 2 Laplacián elektrónovej hustoty v rovine Ni, N(1), N(2)
 Jednotlivé línie reprezentujú hodnoty $-1,0 \times 10^{-3}$, $\pm 2,0 \times 10^{-3}$, $\pm 4,0 \times 10^{-3}$, $\pm 8,0 \times 10^{-3}$ ($n = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$) e \AA^{-5} , plnou modrou líniou sú znázornené kladné hodnoty Laplaciánu, čiarkovanou červenou čiarou záporné hodnoty.

Literatúra:

- [1] Popkov A.; Hanusek, J.; Čermák, J.; Jirásko, R.; Holčapek, M.; Nádvořík, M. *J. Labelled Compd. Radiopharm.* **2007**, *50*, S167.
 [1] Popkov, A.; Gee, A.; Nádvořík, M.; Lyčka, A. *Transition Metal Chem.* **2002**, *27*, 884.
 [3] Kožíšek, J.; Fronc, M.; Skubák, P.; Popkov, A.; Breza, M.; Fuess, H.; Paulmann, C. *Acta Crystallogr. A* **2004**, *60*, 510.

Projekt

***„Podpora vedeckých pobytov na ILL (Grenoble, Francúzsko) a Univerzite v Ausburgu
(Nemecko)“***

**poskytnutím dotácie na zahraničné vedecké pobyty v organizáciách alebo centrách výskumu a vývoja vo väzbe na Európsku výskumnú infraštruktúru, v ktorých je Slovenská republika členom, alebo má významné zastúpenie na výskume a vývoji, podporuje
Ministerstvo školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky**