



Od rodników po wielojądrowe związki koordynacyjne o dedykowanych funkcjonalnościach - pomiędzy syntezą a teorią = From radicals to multinuclear coordination compounds with dedicated functionalities - between synthesis and theory

---

Autorzy

Alina Bieńko

Maciej Witwicki

Urszula Komarnicka

Monika Lesiów

Sandra Kozieł

Daria Wojtala

Jacek Sawka

Magdalena Szmitka

Rok wydania

2026

Czasopismo

Wiadomości Chemiczne

Numer woluminu

80

Strony

481-497

DOI

10.53584/wiadchem.2026.02.19

Kolekcja

Naukowa

Język

Polski

Streszczenie

---

Chemia związków koordynacyjnych stanowi dynamicznie rozwijający się obszar badań, łączący aspekty strukturalne, elektronowe i funkcjonalne kompleksów metali przejściowych. W przedstawionych pracach, prowadzonych w Zespole Materiałów Magnetycznych, skoncentrowano się na trzech kluczowych kierunkach: magnetyzmie molekularnym, układach rodnikowych oraz związkach koordynacyjnych o potencjale biologicznym. W obszarze magnetyzmu molekularnego (SMM, SIM, SCM) zidentyfikowano czynniki strukturalne determinujące anizotropię magnetyczną w kompleksach jonów  $\text{CoII}$ ,  $\text{CuII}$  i  $\text{MnII}$ . Wykazano, że modyfikacje ligandów N-donorowych i pseudohalogenowych umożliwiają kontrolowane dostrajanie parametrów magnetycznych poprzez zmianę geometrii koordynacyjnej. Połączenie badań eksperymentalnych (EPR, HFEPR, FIRMS) i teoretycznych (DFT, CASSCF/NEVPT2) pozwoliło na weryfikację kryteriów występowania powolnej relaksacji magnetycznej oraz identyfikację alternatywnych mechanizmów relaksacyjnych. Badania nad układami rodnikowymi obejmowały analizę oddziaływań spinowych w kompleksach metali przejściowych, ze szczególnym uwzględnieniem jonów  $\text{CuII}$ . Połączenie spektroskopii EPR i metod modelowania molekularnego umożliwiło określenie struktury i charakteru centrów rodnikowych, w tym biologicznie istotnych układów uczestniczących w generacji reaktywnych form tlenu (RFT). Wykazano związek pomiędzy obecnością kompleksów  $\text{CuII}$  a procesami oksydacyjnymi leżącymi u podstaw chorób nowotworowych, neurodegeneracyjnych i infekcyjnych, w tym COVID-19. Równolegle opracowano związki koordynacyjne o potencjale terapeutycznym, obejmujące kompleksy  $\text{RuII}$ ,  $\text{IrIII}$  i  $\text{CuI}$  z ligandami N- i P-donorowymi. Otrzymane układy wykazywały wysoką aktywność przeciwnowotworową i przeciwdrobnoustrojową przy niskiej toksyczności wobec komórek zdrowych. Wykazano, że sprzężenie kompleksów z antybiotykami fluorochinolonowymi oraz ich enkapsulacja w bilosomach zwiększają selektywność i skuteczność biologiczną. Uzyskane wyniki podkreślają znaczenie integracji metod syntezy, spektroskopii i modelowania teoretycznego w racjonalnym projektowaniu funkcjonalnych materiałów koordynacyjnych o potencjalnych zastosowaniach w magnetyzmie molekularnym, biologii i medycynie.

#### Słowa kluczowe

molecular magnetism, radical systems, coordination chemistry, medicinal chemistry, organometallic chemistry

magnetyzm molekularny, układy rodnikowe, chemia koordynacyjna, chemia medyczna, chemia metaloorganiczna

#### Licencja otwartego dostępu

#### OTHER

Pełny tekst licencji:

#### Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.53584/wiadchem.2026.02.19>

Plik został wygenerowany dnia 2026-10-08 07:03:11

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/B6p6eks>.