

Em. Prof. dr hab. Mirosław Szafran

Publikacje 2004

1.a. Publikacje w czasopismach wyróżnionych z listy Filadelfijskiego Instytutu Informacji Naukowej

1. „Crystal and molecular structure of 1-piperidiniumacetic acid chloride studied by X-ray, B3LYP and PM3 calculations”
Z.Dega-Szafran, G.Dutkiewicz, Z.Kosturkiewicz, M.Petryna, M.Szafran
J. Mol. Struct. 690, 2004, p.1-7
2. „Crystal and molecular structure of bis(N-methylpiperidine betaine) hydroiodide”
Z.Dega-Szafran, M.Szafran, E.Dulewicz, A.Addlagatta, M.Jaskólski
J. Mol. Struct. 691, 2004, p.217-225
3. „Crystal and molecular structure of N-methylpiperidine betaine hydrofluoride”
M.Szafran, Z.Dega-Szafran, R.Thaimattam, M.Jaskólski
J. Mol. Struct. 706, 2004, p.49-55
4. „Crystal and molecular structure of the 2:1 complex of 1-piperidineacetic acid with perchloric acid”
Z.Dega-Szafran, M.Petryna, M.Szafran, E.Tykarska
J. Mol. Struct. 688, 2004, p.121-128
5. „Crystal and molecular structure, hydrogen bonding and electrostatic interactions of bis(pyridine betaine) perchlorate”
M.Szafran, A.Katrusiak, I.Kowalczyk, Z.Dega-Szafran, M.Drozd
J. Mol. Struct. 689, 2004, p.213-222
6. „Crystal and molecular structure, hydrogen bonding and electrostatic interactions of bis(trigonelline) hydrogen perchlorate monohydrate”
M.Szafran, A.Katrusiak, J.Koput, Z.Dega-Szafran
J. Mol. Struct. 704, 2004, p.45-52
7. „Crystal and single molecule structures of N-phenacyl-4-cyanopyridinium bromide”
A.Szwajca, A.Katrusiak, M.Szafran
J. Mol. Struct. 705, 2004, p.159-165
8. „Generation and stability of N-phenacyl-4-R-pyridinium ylides in silicon polypodands”
B.Łęska, A.Szwajca, G.Schroeder, M.Szafran
J. Mol. Struct. 700, 2004, p.169-173
9. „Spectroscopic and structural properties of some N-(2-hydroxyethyl)-morpholine derivatives”
Z.Dega-Szafran, M.Szafran, A.Katrusiak
J. Mol. Struct. 704, 2004, p.129-137
10. „Spectroscopic studies of N-methylpiperidine betaine complexes with phenols”
Z.Dega-Szafran, E.Dulewicz, M.Szafran
J. Mol. Struct. 704, 2004, p.155-161
11. „The reaction of substituted N-phenacyl-pyridinium bromides in the pyridine ring with DABCO and DBU in water and DMSO. Kinetics and DFT studies”
A.Szwajca, B.Łęska, G.Schroeder, M.Szafran
J. Mol. Struct. 708, 2004, p.87-95
12. „X-Ray, MP2 and DFT studies of the structure and vibrational spectra of homarinium chloride”
M.Szafran, J.Koput, Z.Dega-Szafran, A.Katrusiak
J. Mol. Struct. 700, 2004, p.109-125
13. „Acidity of the N+Ch2 Protons in N-Phenacyl-R-pyridinium Bromides”
M.Szafran, A.Szwajca
Pol. J. Chem. 78, 2004, p.2131-2140

1.b. Publikacje w innych recenzowanych czasopismach nie będących na liście Filadelfijskiej o cyrkulacji międzynarodowej

1. „Theoretical and Experimental 1H and 13C NMR Spectra of 3-Hydroxypyridine, 3-Methoxypyridine, and N-Ethyl-3-Oxypyridinium Betaine”
A.Komasa, M.Szafran
Computation. Meth. Scien. Technol. 10(1), 2004, p.47-56

1.c. Publikacje w recenzowanych wydawnictwach zbiorowych

Em. Prof. dr hab. Mirosław Szafran

1. „4-Hydroxy-1-methyl-piperidine betaine hydrochloride, structure, conformations, spectroscopic properties” w "Annals of the Pol.Chem.Soc."
Z.Dega-Szafran, E.Dulewicz, G.Dutkiewicz, Z.Kosturkiewicz, M.Szafran
PTCh Warszawa 3, 2004, p.427-430
2. „Effects of counter ion and stoichiometry on the structure, hydrogen bonnging and conformation of N-methylpiperidine betaine hydrohalides” w "Annals of the Pol.Chem.Soc."
Z.Dega-Szafran, M.Szafran, M.Jaskólski, E.Dulewicz
PTCh Warszawa 3, 2004, p.399-402
3. „Rotation barreiers of isostructural N-methylpiperidine betaine hydrochloride and (1-methylcyclohexyl)acetic acid analyzed by B3LYP calculations” w "Annals of the Pol.Chem.Soc."
M.Szafran, Z.Dega-Szafran, J.Koput
PTCh Warszawa 3, 2004, p.395-398

Prace magisterskie ukończone w 2004 roku

Brak w bazie danych o pracach magisterskich