Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Symmetry/asymmetry of the NHN hydrogen bond in protonated 1,8-bis(dimethylamino)naphthalene.

Autorzy

Patrycja Piękoś

Aneta Jezierska

Jarosław J. Panek

Eugene A. Goremychkin

Alexander F. Pozharskii

Alexander S. Antonov

Peter M. Tolstoy

Aleksander Filarowski

Rok wydania

2020

Czasopismo

Symmetry

Numer woluminu

12

Strony

1924/1-1924/26

DOI

10.3390/sym12111924

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Experimental and theoretical results are presented based on vibrational spectra and motional dynamics of 1,8-bis(dimethylamino)naphthalene (DMAN) and its protonated forms ($DMANH^+$ and the $DMANH^+$ HSO_4^- complex). The studies of these compounds have been performed in the gas phase and solid-state. Spectroscopic investigations were carried out by infrared spectroscopy (IR), Raman, and incoherent inelastic neutron scattering (IINS) experimental methods. Density functional theory (DFT) and Car–Parrinello molecular dynamics (CPMD) methods were applied to support our experimental findings. The fundamental investigations of hydrogen bridge vibrations were accomplished on the basis of isotopic substitutions (NH → ND). Special attention was paid to the bridged proton dynamics in the $DMANH^+$ complex, which was found to be affected by interactions with the HSO_4^- anion

Słowa kluczowe

IINS, DMAN, proton sponge, intramolecular hydrogen bond, DFT, CPMD

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:
https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.3390/sym12111924

Strona internetowa wydawcy

http://www.mdpi.com/journal/metals

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-10 11:09:06

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/-XXjGtD.