Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

The pH-induced shift in the*g*-tensor components of semiquinone-type radicals in humic acids-DFT and EPR studies.

Autorzy

Maciej Witwicki

Adrian R. Jaszewski

Julia Jezierska

Maria Jerzykiewicz

Adam Jezierski

Rok wydania

2008

Czasopismo

Chemical Physics Letters

Numer woluminu

462

Strony

300-306

DOI

10.1016/j.cplett.2008.07.086

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

DFT method has been applied to calculate pK_a and *g*-tensors values of semiquinone radicals mimicking the radicals present in humic acids. The results obtained support the hypothesis that naturally occurring stable semiquinone radicals (*native* form) are trapped in the humic acid macromolecule matrices which unables their direct involvement in the acid–base equilibrium with short-lived radicals (*transient* form). The differences between calculated *g* parameters for protonated and deprotonated model radicals are similar to those observed for humic acids allowing to attribute the stable radicals to protonated semiquinones and the short-lived radicals to deprotonated forms.

Adres publiczny

https://doi.org/10.1016/j.cplett.2008.07.086

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-03 12:09:51

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/2chECgI.