Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

The (2:1) complex of picric acid with tetramethylpyrazine: the structure, IR spectra and tunnel splitting of methyl groups.

Autorzy

Wanda Sawka-Dobrowolska

Grażyna Bator

Lucjan Sobczyk

Eugeniusz Grech

J. Nowicka-Scheibe

Andrzej Pawlukojć

J. Wuttke

Rok wydania

2010

Czasopismo

Journal of Molecular Structure

Numer woluminu

975

Strony

298-302

DOI

10.1016/j.molstruc.2010.04.041

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The crystal structure of 2:1 picric acid (PAH) with tetramethylpyrazine (TMP) was determined by using X-ray diffraction studies. Two equivalent $^{+}NH\cdots O^{-}$ hydrogen bonds are formed with the length of 2.601 Å (calculated 2.640 Å). In the IR spectra very broad doublet at *ca*. 2000 and 2400 cm^{-1} is observed, which can be interpreted as due to symmetric and asymmetric ^{+}NH vibrations. In neutron backscattering two tunnel splittings are observed, in agreement with the symmetry of 2:1 assemblies. At 4 K the tunnel peaks are located at 3.17 and 4.24 μeV.

Słowa kluczowe

Tetramethylpyrazine–picric acid complex, Hydrogen bond Infra-red spectra, Tunneling splitting

Adres publiczny

https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2010.04.041

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-02 12:38:13
Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/3nAVd_H.