Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Hydrogen bonds in betaine-acid (1:1) crystals revealed by Raman and ^{13}C chemical shift tensors.

Autorzy

Marek Ilczyszyn

Maria M. Ilczyszyn

Rok wydania

2017

Czasopismo

Journal of Molecular Structure

Numer woluminu

1137

Strony

292-299

DOI

10.1016/j.molstruc.2017.02.048

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

H-bonds of five betaine-acid (1:1) crystals are considered by analysis of tensors based on the Raman scissoring mode and ^{13}C chemical shift of the betaine $–CO_1O_2^-$ carboxylate group. The leading structural factor in these systems is the strongest H-bond linking the betaine and the acidic moieties, $(O_1\cdots H\text{-}O)_{com}$. The Raman and NMR tensors are strongly related to its character and to the $R(O_1\cdots O)_{com}$ distance. Very high molecular polarizability variation due to the scissoring vibration was found for the betaine-selenious acid crystal. The probable reason is modest network of H-bonds in this case and relatively high proton polarizability of these bonds

Słowa kluczowe

Betaine-acid crystals, hydrogen bonds, Raman tensor, NMR tensor, Proton polarizability

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.02.048

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-08 01:01:27

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/42ZalRd.