Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

N–H···O versus O–H···O: density functional calculation and first principle molecular dynamics study on a quinoline-2-carboxamide N-oxide.

Autorzy

Aneta Jezierska

Rok wydania

2015

Czasopismo

Journal of Molecular Modeling

Numer woluminu

21

Strony

47/1-47/10

DOI

10.1007/s00894-015-2587-3

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

N-oxide-type compounds are the object of current research interest due to the presence of resonance-assisted N–H···O hydrogen bonds. Here, the metric and spectroscopic parameters of N-methyl-quinoline-2-carboxamide 1-oxide were computed on the basis of density functional theory and Car-Parrinello molecular dynamics. Computations were performed in vacuo and in solid state; for both phases additional simulations with Grimme's dispersion correction were carried out. The approaches used were able to reproduce correctly the structural aspects of the studied compound and shed more light on the hydrogen bonding with special focus on bridge proton mobility. Proton transfer phenomena were found not to occur in the investigated compound, and the bridge proton was localized to the donor site. This observation is in agreement with the classical theory of the acidity of donor–acceptor sites. The presence of hydrogen bonding was confirmed using atoms-in-molecules theory. The computational results were compared with available experimental data.

Słowa kluczowe

N-oxide, intramolecular hydrogen bond, density functional theory, atoms in molecules, Car-Parrinello molecular dynamics, Gas and crystalline phase

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/10.1007/s00894-015-2587-3

Strona internetowa wydawcy

http://link.springer.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-15 06:48:39
Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/8LZJ4Ix.