

DFT insight into *o*-semiquinone radicals and Ca²⁺ ion interaction: structure, *g* tensor, and stability.

Autorzy

Maciej Witwicki

Julia Jezierska

Rok wydania

2013

Czasopismo

Theoretical Chemistry

Accounts

Numer woluminu

132

Strony

1383/1-1383/13

DOI

10.1007/s00214-013-1383-3

Kolekcja

Naukowa

Język

Polski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Density functional theory methods were employed to elucidate the interactions between calcium ions and various *o*-semiquinone radicals mimicking the interactions occurring in biochemical systems. Predicted changes in the molecular and electronic structures of the radicals on Ca²⁺ coordination were correlated with the changes of *g* tensor and compared with those exerted by Mg²⁺ ions (reported by us previously). In order to broaden the insight into the differences between the Mg²⁺ and Ca²⁺ complexes, their relative stability was estimated on the basis of theoretically predicted Gibbs energies for the process of the complex formation.

Słowa kluczowe

EPR, ESR, Semiquinone radicals, Paramagnetic complexes, Radical ligands

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/s00214-013-1383-3>

Strona internetowa wydawcy

<http://link.springer.com>

