

Bis(10-oxacorrole) with Fused Pyridine as a Linker: Synthesis, Structure, and Interaction between the Subunits in the Neutral, Mono-, and Dicationic States

Autorzy

Qin Liu

Sha Li

Guoru Chen

Xiaofang Li

Aleksandra Gałązka

Michał J. Białek

Piotr J. Chmielewski

Rok wydania

2025

Czasopismo

Chemistry-A European
Journal

Numer woluminu

31

Strony

e202501085/1-

e202501085/12

DOI

10.1002/chem.202501085

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Streszczenie

Pyridine-fused bis(oxacorrole)s are obtained by a Hantzsch-type cyclization using arylaldehydes and 3-amino-10-oxacorrole. Spectroscopic characteristics, corroborated by density functional theory (DFT) calculations, indicate aromaticity of the dimer and strong interaction between the subunits. Electrochemical and spectroelectrochemical analyses indicate facile access to cation radicals and dicationic species. The oxidized forms are characterized by electronic and electron spin resonance (ESR) spectroscopies as well as by DFT calculations. Monocations give rise to strong absorption bands in the near infra-red (NIR) region between 1500 and 2500 nm, while dications are characterized by a series of absorptions between 1000 and 2200 nm. ESR and variable temperature (VT) nuclear magnetic resonance (NMR) experiments indicate the presence of singlet-triplet spin equilibria for the solution of the dication. For the dication of bis(oxacorrole) in the singlet ground state, neither aromaticity nor antiaromaticity has been detected by low-temperature ^1H NMR and gauge independent atomic orbital (GIAO) calculations despite delocalization of π -electrons.

Słowa kluczowe

antiaromaticity, aromaticity, biradicaloids, porphyrinoids, radicals

Typ publikacji

Artykuł

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/10.1002/chem.202501085>

Strona internetowa wydawcy

onlinelibrary.wiley.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-05-14 17:19:18

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/A06klH6>.