

Structure and IR spectroscopic properties of HNCO complexes with SO₂ isolated in solid argon.

Autorzy

Justyna Krupa

Maria Wierzejewska

Jan Lundell

Rok wydania

2021

Czasopismo

Molecules

Numer woluminu

26

Strony

6441/1-6441/13

DOI

10.3390/molecules26216441

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

FTIR spectroscopy was combined with the matrix isolation technique and quantum chemical calculations with the aim of studying complexes of isocyanic acid with sulfur dioxide. The structures of the HNCO...SO₂ complexes of 1:1, 1:2 and 2:1 stoichiometry were optimized at the MP2, B3LYPD3, B2PLYPD3 levels of theory with the 6-311++G(3df,3pd) basis set. Five stable 1:1 HNCO...SO₂ complexes were found. Three of them contain a weak N-H...O hydrogen bond, whereas two other structures are stabilized by van der Waals interactions. The analysis of the HNCO/SO₂/Ar spectra after deposition indicates that mostly the 1:1 hydrogen-bonded complexes are present in argon matrices, with a small amount of the van der Waals structures. Upon annealing, complexes of the 1:2 stoichiometry were detected, as well.

Słowa kluczowe

hydrogen bond, van der Waals interaction, Matrix isolation, vibrational spectroscopy, computational chemistry

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/10.3390/molecules26216441>

Plik został wygenerowany dnia 2026-10-06 02:18:12

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