Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Anomalous strengthening of the intramolecular hydrogen bond by steric repulsion.

Autorzy

Aleksander Filarowski

Anna Szemik-Hojniak

Tadeusz Głowiak

Aleksander Koll

Rok wydania

1997

Czasopismo

Journal of Molecular Structure

Numer woluminu

404

Strony

67-74

DOI

10.1016/S0022-2860(96)09363-5

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The crystal structures of two ortho-aminomethylphenols, the 4,5-dimethyl- and 3,5,6-trimethyl-2(*N*,*N*-dimethylaminomethyl) phenols, were determined. The stronger intramolecular hydrogen bond was found in the compound with the higher number of methyl substituents. This result was supported by IR spectra. The atomic charge distribution calculated by the MNDO-PM3 method predicts higher strengths of the hydrogen bond in 4,5-dimethyl-2(*N*,*N*-dimethylaminomethyl) phenol molecules. Both theoretical calculations and crystallographic results explain the observed effects with reference to the steric interaction of the ortho methyl group which squeezes the O□Htctdot;N hydrogen bridge.

Słowa kluczowe

Hydrogen bonding, Ortho-aminophenols, Steric repulsion, X-ray crystallography

Adres publiczny

https://doi.org/10.1016/S0022-2860(96)09363-5

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-04 07:24:21

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/DFZC7bd.