

## Spectroscopic identification of hydrogen bond vibrations and quasi-isostructural polymorphism in N-salicylideneaniline.

### Autorzy

Łukasz Hetmańczyk  
Eugene A. Goremychkin  
Janusz Waliszewski  
Mikhail V. Vener  
Paweł Lipkowski  
Peter M. Tolstoy  
Aleksander Filarowski

### Rok wydania

2021

### Czasopismo

Molecules

### Numer woluminu

26

### Strony

5043/1-5043/13

### DOI

10.3390/molecules26165043

### Kolekcja

Naukowa

### Język

Angielski

### Typ publikacji

Artykuł

### Streszczenie

The ortho-hydroxy aryl Schiff base 2-[(E)-(phenylimino)methyl]phenol and its deuterio-derivative have been studied by the inelastic incoherent neutron scattering (IINS), infrared (IR) and Raman experimental methods, as well as by Density Functional Theory (DFT) and Density-Functional Perturbation Theory (DFPT) simulations. The assignments of vibrational modes within the 3500–50 cm<sup>-1</sup> spectral region made it possible to state that the strong hydrogen bond in the studied compound can be classified as the so-called quasi-aromatic bond. The isotopic substitution supplemented by the results of DFT calculations allowed us to identify vibrational bands associated with all five major hydrogen bond vibrations. Quasi-isostructural polymorphism of 2-[(E)-(phenylimino)methyl]phenol (**SA**) and 2-[(E)-(phenyl-D<sub>5</sub>-imino)methyl]phenol (**SA-C<sub>6</sub>D<sub>5</sub>**) has been studied by powder X-ray diffraction in the 20–320 K temperature range.

### Słowa kluczowe

Schiff bases, inelastic incoherent neutron scattering, hydrogen bond, isotopic effect

### 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/molecules26165043>

Plik został wygenerowany dnia 2026-05-14 20:10:36

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/DxXf5RU>.