Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Difluorenoheteroles: topological control of π conjugation in diradicaloids and mixed-valence radical ions

Autorzy

Bibek Prajapati

Tendai Kwenda

Tadeusz Lis

Piotr J. Chmielewski

Carlos J. Gómez-García

Marcin A. Majewski

Marcin Stępień

Rok wydania

2024

Czasopismo

Chemical Science

Numer woluminu

15

Strony

10101-10109

DOI

10.1039/d4sc02459a

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Two families of difluorenoheterole diradicaloids were synthesized, featuring isomeric ring systems with distinct conjugation topologies. The two types of difluorenoheteroles contain, respectively, a Chichibabin-like motif (**CH**) and a newly introduced heteroatom-linked triphenylmethyl dyad (**TD**-X). Combined experimental and theoretical investigations show that the **TD**-X systems have reduced quinoidal character but the interaction between formal spin centers is sufficiently strong to ensure a singlet ground state. The singlet–triplet energy gaps in the **TD**-X difluorenoheteroles are strongly affected by the heterocyclic ring, with values of −4.3 and −0.7 kcal mol^{-1} determined for the pyrrole- and thiophene-containing analogues, respectively. In cyclic voltammetry experiments, the **TD**-X systems show diminished energy gaps and superior reversibility in comparison with their **CH** counterparts. The radical anions and cations obtained from these diradicaloids show extremely red-shifted bands, occasionally with λ_{max} > 3500 nm. Computational studies show that some of these ions adopt distonic structures and may be characterized as class-II mixed-valence species.

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/10.1039/D4SC02459A

Strona internetowa wydawcy

https://www.rsc.org/

Plik został wygenerowany dnia 2026-10-30 03:50:03

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