Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Is it conjugated or not? The theoretical and experimental electron density map of bonding in *p*-$CH_3CH_2COC_6H_4$-C≡C-C≡C-*p*-$C_6H_4COCH_3CH_2$.

Autorzy

Przemysław Starynowicz

Sławomir Berski

Nurbey Gulia

Karolina Osowska

Tadeusz Lis

Sławomir Szafert

Rok wydania

2020

Czasopismo

Molecules

Numer woluminu

25

Strony

4388/1-4388/11

DOI

10.3390/molecules25194388

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The electron density of p-$CH_3CH_2COC_6H_4$-C≡CC≡C-p-$C_6H_4COCH_3CH_2$ has been investigated on the basis of single-crystal X-ray diffraction data collected to high resolution at 100 K and from theoretical calculations. An analysis of the X-ray data of the diyne showed interesting “liquidity” of electron distribution along the carbon chain compared to 1,2-diphenylacetylene. These findings are compatible with the results of topological analysis of Electron Localization Function (ELF), which has also revealed a larger (than expected) concentration of the electron density at the single bonds. Both methods indicate a clear π-type or “banana” character of a single bond and a significant distortion from the typical conjugated structure of the bonding in the diyne with a small contribution of cumulenic structures.

Słowa kluczowe

polyynes, density map, single-crystal X-ray diffraction, theoretical calculations, electron localization function

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/molecules25194388

Strona internetowa wydawcy

http://www.mdpi.com/journal/metals

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-05 07:00:47

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/JGo8wvR.