

Is it conjugated or not? The theoretical and experimental electron density map of bonding in  $p\text{-CH}_3\text{CH}_2\text{COC}_6\text{H}_4\text{-C}\equiv\text{C-C}\equiv\text{C-p-C}_6\text{H}_4\text{COCH}_3\text{CH}_2$ .

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  $p\text{-CH}_3\text{CH}_2\text{COC}_6\text{H}_4\text{-C}\equiv\text{CC}\equiv\text{C-p-C}_6\text{H}_4\text{COCH}_3\text{CH}_2$  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  $\pi$ -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 cumulenenic 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>

Plik został wygenerowany dnia 2026-05-18 00:28:00

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/JGo8vwR>.