Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Molecular structure and electric properties of *N*-methyl-*N*-nitroaniline and its derivatives.

Autorzy

O. V. Prezhdo

A. S. Bykova

V. V. Prezhdo

Aleksander Koll

Z. Daszkiewicz

Rok wydania

2001

Czasopismo

Journal of Molecular Structure

Numer woluminu

559

Strony

321-330

DOI

10.1016/S0022-2860(00)00707-9

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

A comparative study of the molecular structure of*N*-methyl-*N*-nitroaniline and its derivatives is carried out employing the Kerr effect and dipole moments methods in combination with the crystallographic analysis. The obtained experimental structural data agree with the quantum-chemical calculations by the B3LYP/6-31G* and MP2/3-21G* methods. The measurement and calculation results are used to draw conclusions about the mutual interaction and role of various substituents to the *N*-methyl-*N*-nitroaniline molecule.

Słowa kluczowe

Molecular structure, Dipole moment, Kerr constant, N-methyl-N-nitroaniline and its derivatives, N, N-dimethylnitramine

Adres publiczny

https://doi.org/10.1016/S0022-2860(00)00707-9

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-04 03:21:55

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