

Breaking Global Diatropic Current to Tame Diradicaloid Character: Thiele's Hydrocarbon Under Macrocyclic Constraints

Autorzy

Piotr Banachowicz

Mainak Das

Krzysztof Kruczała

Miłosz Siczek

Zbigniew Sojka

Monika Kijewska

Miłosz Pawlicki

Rok wydania

2024

Czasopismo

Angewandte Chemie -
International Edition

Numer woluminu

63

Strony

e202400780/1-e202400780/9

DOI

10.1002/anie.202400780

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

A diradical/biradical character of organic derivatives is one of the key aspects of contemporary research focusing on the fundamental studies followed by potential applicability relying on the unique optical, electronic, or magnetic properties assigned to unpaired electrons. A precise involvement of two *p*-phenylenes into a cyclophane-like conjugated, diatropic system creates a flexible molecule with the two different characters of both subunits (benzene and quinone) imprinting into the structure a Kekulé delocalized system. A dynamic of both carbocyclic subunits, and their mutual interaction generates a singlet open-shell state ($J = -1.25$ kcal/mol) as documented spectroscopically (NMR and EPR). The extended theoretical analysis has proved a correlation between dihedral angle and the diradicaloid character that shifts from a closed-shell singlet to an open-shell state, eventually showing the $y_0 = 0.86$ for 78 degrees and $\Delta E_{ST} = -0.34$ kcal/mol.

Słowa kluczowe

macrocycle, Thiele's hydrocarbon, diradicaloid, pi-conjugation, phenylenes

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/10.1002/anie.202400780>

Plik został wygenerowany dnia 2026-04-19 03:23:59

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