

Conformational properties and photochemistry of tetrazolylpyridines in low temperature matrices. Spectroscopic evidence for the photochemical carbon-to-nitrogen rearrangement.

Autorzy

Magdalena Pagacz-
Kostrzewa
Justyna Krupa
Adriana Olbert-Majkut
Marta Podruczna
Robert Bronisz
Maria Wierzejewska

Rok wydania

2011

Czasopismo

Tetrahedron

Numer woluminu

67

Strony

8572-8582

DOI

10.1016/j.tet.2011.08.055

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The most stable conformers of 2-(tetrazol-1-yl)-, 3-(tetrazol-1-yl)- and 2-(tetrazol-5-yl)pyridines undergo photolysis in Ar matrices at cryogenic temperatures to yield pyridin-2-ylcarbodiimide or pyridin-3-ylcarbodiimide. Spectroscopic evidence of carbon-to-nitrogen rearrangement in the case of the 2-(tetrazol-5-yl)pyridine molecule is provided. For the latter molecule a second pathway leads to the 1-cyclopenta-2,4-dienylketenimine formation. The experimental findings are supported by extensive B3LYP/6-311++G(2d,2p) calculations.

Słowa kluczowe

Tetrazole, Photolysis, Matrix isolation, Carbon-to-nitrogen rearrangement, infrared spectra, B3LYP calculations

Adres publiczny

<https://doi.org/10.1016/j.tet.2011.08.055>

Strona internetowa wydawcy

<http://www.elsevier.com>

Plik został wygenerowany dnia 2026-10-03 05:51:25

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