

Car-Parrinello and path integral molecular dynamics study of the intramolecular hydrogen bonds in the crystals of benzoylacetone and dideuterobenzoylacetone.

Autorzy

Piotr Durlak

Zdzisław Latajka

Rok wydania

2014

Czasopismo

Physical Chemistry Chemical
Physics

Numer woluminu

16

Strony

23026-23037

DOI

10.1039/c4cp02569e

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The dynamics of the intramolecular short hydrogen bond in the molecular crystal of benzoylacetone and its deuterated analogue are investigated using ab initio molecular dynamics simulations. A study on intramolecular hydrogen bonding in 1-phenyl-1,3-butadione (I) and 1-deuteroxy-2-deutero-1-phenylbut-1-en-3-one (II) crystals has been carried out at 160 K and 300 K on the CPMD method level and at 300 K on the PIMD method level. The analysis of the two-dimensional free-energy landscape of reaction coordinate d -parameter and ROO distances shows that the hydrogen (deuter) between the two oxygen atoms adopts a slightly asymmetrical position in the single potential well. When the nuclear quantum effects are taken into account, very large delocalization of the bridging proton is observed. These studies indicate that hydrogen bonds in the crystal of benzoylacetone have characteristic properties for the type of bonding model resonance-assisted hydrogen bonds (RAHB) without existing the equilibrium of the two tautomers. The infrared spectrum has been calculated, and a comparative vibrational analysis has been performed. The CPMD vibrational results appear to qualitatively agree with the experimental ones.

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/10.1039/c4cp02569e>

Strona internetowa wydawcy

<https://www.rsc.org/>

Plik został wygenerowany dnia 2026-05-04 17:31:59

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/X6Khmb6>.