

Inter- vs. intramolecular hydrogen bond patterns and proton dynamics in nitrophthalic acid associates.

Autorzy

Kinga Jóźwiak
Aneta Jezierska
Jarosław J. Panek
Eugene A. Goremychkin
Peter M. Tolstoy
Ilya G. Shenderovich
Aleksander Filarowski

Rok wydania

2020

Czasopismo

Molecules

Numer woluminu

25

Strony

4720/1-4720/22

DOI

10.3390/molecules25204720

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Noncovalent interactions are among the main tools of molecular engineering. Rational molecular design requires knowledge about a result of interplay between given structural moieties within a given phase state. We herein report a study of intra- and intermolecular interactions of 3-nitrophthalic and 4-nitrophthalic acids in the gas, liquid, and solid phases. A combination of the Infrared, Raman, Nuclear Magnetic Resonance, and Incoherent Inelastic Neutron Scattering spectroscopies and the Car–Parrinello Molecular Dynamics and Density Functional Theory calculations was used. This integrated approach made it possible to assess the balance of repulsive and attractive intramolecular interactions between adjacent carboxyl groups as well as to study the dependence of this balance on steric confinement and the effect of this balance on intermolecular interactions of the carboxyl groups.

Słowa kluczowe

proton dynamics, carboxyl group, IINS, IR, Raman, NMR, CPMD, DFT

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/molecules25204720>

Plik został wygenerowany dnia 2026-10-03 20:04:14

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/YS-l1gQ>.