Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Electron-topological, energetic and π-electron delocalization analysis of ketoenamine-enolimine tautomeric equilibrium.

Autorzy

Agata Martyniak

Paweł Lipkowski

Noel Boens

Aleksander Filarowski

Rok wydania

2012

Czasopismo

Journal of Molecular Modeling

Numer woluminu

18

Strony

257-263

DOI

10.1007/s00894-011-1075-7

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The ketoenamine-enolimine tautometic equilibrium has been studied by the analysis of aromaticity and electron-topological parameters. The influence of substituents on the energy of the transition state and of the tautomeric forms has been investigated for different positions of chelate chain. The quantum theory of atoms in molecules method (QTAIM) has been applied to study changes in the electron-topological parameters of the molecule with respect to the tautomeric equilibrium in intramolecular hydrogen bond. Dependencies of the HOMA aromaticity index and electron density at the critical points defining aromaticity and electronic state of the chelate chain on the transition state (TS), OH and HN tautomeric forms have been obtained.

Słowa kluczowe

Aromaticity, Carbonylamine, Enolimine, intramolecular hydrogen bond, QTAIM, Tautomeric equilibrium, HOMA

Adres publiczny

http://dx.doi.org/ 10.1007/s00894-011-1075-7

Strona internetowa wydawcy

http://link.springer.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-15 06:45:19

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