Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

# Conformational isomerism of pyridoxal : infrared matrix isolation and theoretical studies.

Autorzy

Anna Kwiatek

Zofia Mielke

Rok wydania

2015

Czasopismo

Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular Spectroscopy

Numer woluminu

135

Strony

1099-1106

DOI

10.1016/j.saa.2014.07.067

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

A combined matrix isolation FTIR and theoretical DFT/B3LYP/6-311++G(2p,2d) study of pyridoxal was performed. The calculations resulted in five stable PLHB conformers stabilized by intramolecular O-H···O bonding between phenolic OH and carbonyl C=O groups and another thirteen conformers in which OH or/and aldehyde groups are rotated by 180° around CO or/and CC bonds leading, respectively, to formation of PLO, PLA and PLOA conformers. The analysis of the spectra of the as-deposited matrix indicated that two most stable PLHB1 and PLHB2 conformers with intramolecular hydrogen bond are present in the matrix. The exposure of the PL/Ar matrix to mercury lamp radiation (λ>345 nm) induced conformational change of PLHB isomers to PLOA ones.

Słowa kluczowe

pyridoxal, infrared spectra, Matrix isolation, Conformational isomerism, DFT calculation

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.1016/j.saa.2014.07.067

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-09 08:15:46

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