

Impact of deuteration and temperature on furan ring dynamics.

Autorzy

Przemysław Dopieralski

Irina V. Omelchenko

Zdzisław Latajka

Rok wydania

2021

Czasopismo

Molecules

Numer woluminu

26

Strony

2889/1-2889/7

DOI

10.3390/molecules26102889

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Despite significant progress in conformational analysis of cyclic molecules, the number of computational studies is still limited while most of that available in the literature data have been obtained long time ago with outdated methods. In present research, we have studied temperature driven conformational changes of the furan ring at three different temperatures. Additionally, the effect of deuteration on the ring dynamics is discussed; in addition, the aromaticity indices following the Bird and HOMA schemes are computed along all trajectories. Our ab initio molecular dynamic simulations revealed that deuteration has changed the furan ring dynamics and the obvious consequences; in addition, the shape and size of molecule are expected to be different.

Słowa kluczowe

isotope effect, computational chemistry, aromaticity, furan, puckering

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/molecules26102889>

Strona internetowa wydawcy

<http://www.mdpi.com/journal/metals>

Plik został wygenerowany dnia 2026-04-26 05:30:25

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/dt3Q-t1>.