Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Carbocations confined in a thiatriazuliporphyrin frame.

Autorzy

Natasza Sprutta

Monika Wełnic

Michał J. Białek

Tadeusz Lis

Ludmiła Szterenberg

Lechosław Latos-Grażyński

Rok wydania

2016

Czasopismo

Chemistry-A European Journal

Numer woluminu

22

Strony

6974-6980

DOI

10.1002/chem.201504752

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

In the search for tricarbaporphyrinoids, a three-component acid-catalyzed condensation of azulene, 2,5-bis[(*p*-tolyl)hydroxymethyl]thiophene, and an aryl aldehyde has been elaborated, affording the appropriate thiatriazuliporphyrinogens. The subsequent oxidation yielded a rare example of a macrocyclic organic tetracation, which can be readily and reversibly converted into macrocyclic tri- and dicarbocations by addition of one or two hydroxides bound at the *meso*position(s). Further insight into the influence of carbocation formation on the geometry, electronic structure, and magnetic manifestation in ^{1}H NMR spectroscopy has been obtained by using density functional theory calculations. The charge distribution was evaluated by mapping electron density surfaces with electrostatic potential (ESP).

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.1002/chem.201504752

Strona internetowa wydawcy

onlinelibrary.wiley.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-04 18:16:37

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/f5xGZjC.