

Spectroscopic identification of hydrogen bond vibrations and quasi-isostructural polymorphism in N-salicylideneaniline

Autorzy

Łukasz Hetmańczyk
Eugene A. Goremychkin
Janusz Waliszewski
Mikhail V. Vener
Paweł Lipkowski
Peter M. Tolstoy
Aleksander Filarowski

Rok wydania

2021

Wydawca

MDPI

Miejsce wydania

Basel

Strony

115-127

DOI

10.3390/molecules26165043

bookChapter.title

Intramolecular hydrogen
bonding 2021

ISBN

978-3-0365-2518-1

Kolekcja

Naukowa

Streszczenie

The ortho-hydroxy aryl Schiff base 2-[(E)-(phenylimino)methyl]phenol and its deuterio-derivative have been studied by the inelastic incoherent neutron scattering (IINS), infrared (IR) and Raman experimental methods, as well as by Density Functional Theory (DFT) and Density-Functional Perturbation Theory (DFPT) simulations. The assignments of vibrational modes within the 3500–50 cm⁻¹ spectral region made it possible to state that the strong hydrogen bond in the studied compound can be classified as the so-called quasi-aromatic bond. The isotopic substitution supplemented by the results of DFT calculations allowed us to identify vibrational bands associated with all five major hydrogen bond vibrations. Quasi-isostructural polymorphism of 2-[(E)-(phenylimino)methyl]phenol (**SA**) and 2-[(E)-(phenyl-D₅-imino)methyl]phenol (**SA-C₆D₅**) has been studied by powder X-ray diffraction in the 20–320 K temperature range.

Słowa kluczowe

Schiff bases, inelastic incoherent neutron scattering, hydrogen bond, isotopic effect

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/molecules26165043>

Język

Angielski

Typ publikacji

Rozdział książki

Plik został wygenerowany dnia 2026-05-05 01:20:16

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/FT-pa3u>.