

Single crystal X-ray structure analysis and DFT studies of 3-hydroxyl-1,7,7-trimethyl-3-[5-(4-methylphenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl]bicycle [2.2.1]heptan-2-one.

Autorzy

Ghasem Moghadam
Ali Ramazani
Fatemeh Zeinali Nasrabadi
Hamideh Ahankar
Katarzyna Ślepokura
Tadeusz Lis
Ali Kazami Babaheydari

Rok wydania

2022

Czasopismo

Eurasian Chemical
Communications

Numer woluminu

4

Strony

759-767

DOI

10.22034/ecc.2022.328320.1320

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Single crystal X-ray structure analyses of 3-Hydroxyl-1,7,7-trimethyl-3-[5-(4-methyl phenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl]bicycle [2.2.1] heptan-2-one was performed. In addition, the computational investigations such as optimization energy, infrared spectra, the frontier orbitals of HOMO, LUMO, HOMO-1, and LUMO+1 analysis, molecular electrostatic potential plots, heat capacity, entropy, and charge distribution were performed on the products at DFT/B3LYP methods. The comparison between the experimental and theoretical results demonstrated that these two results are in good agreement.

Słowa kluczowe

Single crystal X-ray analysis, molecular structure, DFT calculations, atom, Ion, 1,3,4-oxadiazole, (1R)-(-)-campherchinon

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/10.22034/ecc.2022.328320.1320>

Strona internetowa wydawcy

<http://echemcom.com>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-18 14:00:08

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/kgUZe1k>.