

Inter- vs. Intra-Molecular Hydrogen Bond in Complexes of Nitrophthalic Acids with Pyridine

Autorzy

Kinga Jóźwiak

Aneta Jezierska

Jarosław J. Panek

Andrzej Kochel

Aleksander Filarowski

Rok wydania

2023

Czasopismo

International Journal of
Molecular Sciences

Numer woluminu

24

Strony

5248/1-5248/14

DOI

10.3390/ijms24065248

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

This study covers the analysis of isomeric forms of nitrophthalic acids with pyridine. This work dwells on the complementary experimental (X-ray, IR and Raman) and theoretical (Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD) and Density Functional Theory (DFT)) studies of the obtained complexes. The conducted studies showed that steric repulsion between the nitro group in ortho-position and the carboxyl group causes significant isomeric changes. Modeling of the nitrophthalic acid—pyridine complex yielded a short strong intramolecular hydrogen bond (SSHB). The transition energy from the isomeric form with an intermolecular hydrogen bond to the isomeric form with an intramolecular hydrogen bond was estimated.

Słowa kluczowe

phthalic acid, proton dynamics, hydrogen bond, steric repulsion, X-ray, IR, Raman, CPMD, DFT

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/ijms24065248>

Strona internetowa wydawcy

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

Plik został wygenerowany dnia 2026-10-05 04:36:51

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