Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Argentophilic Interactions, Flexibility, and Dynamics of Pyrrole Cages Encapsulating Silver(I) Clusters

Autorzy

Bartosz Trzaskowski

Juan Pablo Martinez

Aleksandra Sarwa

Bartosz Szyszko

William A. Goddard

Rok wydania

2024

Czasopismo

Journal of Physical Chemistry A

Numer woluminu

128

Strony

3339-3350

DOI

10.1021/acs.jpca.4c01464

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Recently,pyrrolecageshavebeensynthesizedthatencapsulateion pairsand silver(I)clustersto formintricatesupramolecularcapsules.We reportherea computationalanalysisof thesestructuresusingdensityfunctionaltheorycombinedwitha semiempiricaltight-bindingapproach.We find that for neutralpyrrolecages,the Gibbsfree energiesofformationprovidereliablepredictionsfor the ratioof boundions.Forchargedpyrrolecages,we find strongargentophilicinteractionsbetweenAgions on the basisof the calculatedbondindicesand molecularorbitals.ForthecagewiththeAg4cluster,we findtwominimum-geometryconformationsthat differby only6.5 kcal/mol,withan energybarrier<1kcal/mol,suggestinga veryflexiblestructureas indicatedby moleculardynamics.The predictedenergiesof formationof[Agn⊂1]n-3+(n= 1−5)cryptandsprovidelow energybarriersof formationof 5−20kcal/molfor allcases,whichis consistentwith the experimentaldata.Furthermore,we also examinedthe structuralvariabilityof mixed-valencesilverclustersto test whetheradditionalgeometricalconformationsinsidethe organiccageare thermodynamicallyaccessible.In thiscontext,we showthat the time-dependentdensityfunctionaltheoryUV−visspectramay potentiallyserveas a diagnosticprobetocharacterizemixed-valenceand geometricalconfigurationsof silverclustersencapsulatedinto cryptands.

Słowa kluczowe

Ethers, Ions, Macrocyclic compounds, Metal clusters, Pyrroles

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://doi.org/10.1021/acs.jpca.4c01464

Strona internetowa wydawcy

https://www.acs.org/content/acs/en.html

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-11 02:10:55
Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/paRMFwQ.