

Infrared optical constants and computational studies of neat liquid *n*-butylethylether.

Autorzy

Krzysztof B. Beć

Jerzy P. Hawranek

Rok wydania

2013

Czasopismo

Journal of Spectroscopy

Numer woluminu

2013

Strony

705218/1-705218/8

DOI

10.1155/2013/705218

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Aliphatic ethers are of interest to researchers due to their wide application in the fuel, chemical, and pharmaceutical industry. In this paper we studied vibrational properties of neat liquid *n*-butylethylether (NBEE), including the determination of complex refractive index in the NIR and MIR range (11700–560 cm⁻¹). The high absorption of neat liquid in the MIR range required the use of thin-film transmission recordings. The spectra analysis was based on conformational analysis and anharmonic calculations on B2PLYP/N07D level of theory. Final band assignments procedure was based on potential energy distributions. The theoretical investigation revealed that although 26 conformers of NBEE can be expected to exist in the liquid phase at 298 K, only few of them are essential for the forming of the spectrum. This study is important for the proper understanding of vibrational properties of other aliphatic ethers.

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/10.1155/2013/705218>

Strona internetowa wydawcy

<https://www.hindawi.com/>