

Zintegrowane badania spektroskopowo-teoretyczne: rola obliczeń anharmonicznych w analizie konformacyjnej cząsteczek na przykładzie izomeru glicyny - kwasu acetohydroksamowego (AHA) = Integrated spectroscopic-theoretical approach: the role of anharmonic calculations in the conformational analysis of molecules - the case of glycine isomer, acetohydroxamic acid (AHA)

Autorzy

Magdalena Sałdyka

Daria Bumażnik

Justyna Krupa

Karolina Mucha

Magdalena Pagacz-
Kostrzewa

Małgorzata Biczysko

Rok wydania

2026

Czasopismo

Wiadomości Chemiczne

Numer woluminu

80

Strony

77-94

DOI

10.53584/wiadchem.2026.02.4

Kolekcja

Naukowa

Język

Polski

Streszczenie

Anharmonic infrared spectra of the two conformers of a glycine isomer, acetohydroxamic acid (AHA), have been compared with experimental MI-FTIR spectra, confirming the 1Z → 1E transition upon irradiation at 225 nm. GVPT2 computations at the revDSD-PBEP86/jun-cc-pVTZ level lead to overall good agreement with experiment with mean errors of about 10-12 cm⁻¹, allowing also assignment of several bands to the non-fundamental transitions. It is shown that, due to the different structure and wavenumbers corresponding to fundamental vibrations, the 1Z and 1E conformers show distinct resonance patterns. This work highlights advantages provided by anharmonic computations accounting for the intensities of non-fundamental transitions.

Słowa kluczowe

vibrational spectroscopy, infrared spectroscopy, anharmonicity, VPT2, conformers, acetohydroxamic acid

spektroskopia oscylacyjna, spektroskopia w podczerwieni, anharmoniczność, VPT2, konformery, kwas acetohydroksamowy

Licencja otwartego dostępu**OTHER**

Pełny tekst licencji:

Adres publiczny<http://dx.doi.org/10.53584/wiadchem.2026.02.4>

Artykuł

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-24 05:23:33

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