Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Glycine conformers: a never-ending story?

Autorzy

Vincenzo Barone

Małgorzata Biczysko

Julien Bloino

Cristina Puzzarini

Rok wydania

2013

Czasopismo

Physical Chemistry Chemical Physics

Numer woluminu

15

Strony

1358-1363

DOI

10.1039/c2cp43884d

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The structure and vibrational spectra of a marginally stable conformer of glycine (usually referred to as VIp or ttc) recently detected in low-temperature matrices have been characterized by a state-of-the-art computational approach allowing an overall quality for bond distances, rotational constants, conformational enthalpies and vibrational frequencies well within the chemical accuracy. The high accuracy of the computational results allows us to draw a fully consistent interpretation of the available experimental data and to obtain a more complete characterization of an elusive glycine conformer.

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.1039/c2cp43884d

Strona internetowa wydawcy

https://www.rsc.org/

Plik został wygenerowany dnia 2026-05-14 07:23:51

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/wbXDNwd.