

## Experimental and theoretical investigation of hydrogen bonded complexes between glycolic acid and water

### Autorzy

Justyna Krupa

Iwona Kosendiak

Maria Wierzejewska

Jan Lundell

### Rok wydania

2025

### Czasopismo

Spectrochimica Acta Part A-  
Molecular and Biomolecular  
Spectroscopy

### Numer woluminu

325

### Strony

125081/1-125081/7

### DOI

10.1016/j.saa.2024.125081

### Kolekcja

Naukowa

### Język

Angielski

### Typ publikacji

Artykuł

### Streszczenie

Theoretical MP2 and B3LYPD3 calculations, as well as experimental matrix isolation infrared spectroscopy studies, were used to investigate the 1:1 complexes formed between glycolic acid and water. Out of five computationally predicted forms of GA $\cdots$ H<sub>2</sub>O complex the most stable one was detected experimentally in solid argon. This structure is characterized by two intermolecular OH $\cdots$ O hydrogen bonds depicting a six-member ring in which water acts both as a proton acceptor and as a proton donor. Two other structures with the alcoholic OH group acting as a proton donor are also tentatively suggested to be present in solid argon.

### Słowa kluczowe

Glycolic acid, Molecular complex, Spectroscopy, Computational chemistry, Matrix isolation, Hydrogen bond

### 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/10.1016/j.saa.2024.125081>

### Strona internetowa wydawcy

<http://www.elsevier.com>

