

How many electrons form chemical bonds in the NgBeS (Ng = Ar, Kr, Xe) molecules? Topological study using the electron localisation function (ELF) and electron localisability indicator (ELI-D).

Autorzy

Emilia Makarewicz

Agnieszka J. Gordon

Sławomir Berski

Rok wydania

2016

Czasopismo

Structural Chemistry

Numer woluminu

27

Strony

57-64

DOI

10.1007/s11224-015-0719-0

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Nature of bonding in the NgBeS (Ng = Ar, Kr, Xe) molecules has been studied using topological analysis of ELF, ELI-D functions with the wave function approximated at the DFT (M062X, B3LYP + ZORA), MP2, CCSD and CASSCF level of calculations. Both Xe–Be and Be=S bonds display topological features typical for the covalent-dative bonding. The $V_2(\text{Xe})$ attractor characterising electron density, involved in interaction with the beryllium atom, is closer to the C(Be) core than to C(Xe). The population of the respective basin ranges between 1.59e (B3LYP + ZORA) and 1.83e (CCSD). The beryllium–sulphur bond is described by the bonding disynaptic basin $V(\text{Be},\text{S})$ with the population between 3.22e (CASSCF) and 3.48e (M062X). The approximate weights for the Be–S and Be=S resonance forms are 0.3 and 0.7, respectively, in all molecules. Both the NgBe and BeS bonds are highly polarised with the values of the p_{SBe} and p_{NgBe} polarity indices (CCSD) of 0.8 and 0.9–1.0 for all studied molecules.

Słowa kluczowe

noble gas, xenon, Krypton, Argon, Electron localization function (ELF), chemical 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/10.1007/s11224-015-0719-0>

Strona internetowa wydawcy

<http://link.springer.com>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-22 12:56:21

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