

Topological analysis of the electron localisation function (ELF) applied to the electronic structure of oxaziridine: the nature of N-O bond.

Autorzy

Michał Michalski

Agnieszka J. Gordon

Sławomir Berski

Rok wydania

2019

Czasopismo

Structural Chemistry

Numer woluminu

30

Strony

2181-2189

DOI

10.1007/s11224-019-01407-9

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Topological analysis of the electron localisation function (ELF), natural bond orbital and Wiberg bond index calculations have been applied to study the electronic structure of the oxaziridine molecule with a special focus on the nitrogen-oxygen bond. The calculations have been performed at the DFT(B3LYP, CAM-B3LYP, ω B97XD, M06-L, M06-2X) and post-Hartree-Fock (CCSD(T) and CASSCF) computational levels with applied aug-cc-pVTZ basis set. Nature of N-O bonding has been characterised by two resonance forms, $N+O^-$ and $N-O^+$, owing to a very small population ($< 0.60e$) of the bonding basin $V(N,O)$, localised in the ELF field for the N-O region. The importance of electron correlation effects for the description of the N-O bonding has been observed in the CASSCF calculations. The orbital description (Wiberg, NBO) differs from topological characterisation, indicating a single N-O bond.

Słowa kluczowe

N-O, chemical bond, Single bond, electron localization function, ELF, Topology

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/s11224-019-01407-9>

<http://link.springer.com>

Plik został wygenerowany dnia 2026-10-05 17:53:15

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/OQ7ILNE>.