Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

The nature of the T=T double bond (T = B, Al, Ga, In) in dialumene and its derivatives: topological study of the electron localization function (ELF).

Autorzy

Michał Michalski

Agnieszka J. Gordon

Sławomir Berski

Rok wydania

2019

Czasopismo

Journal of Molecular Modeling

Numer woluminu

25

Strony

211/1-211/11

DOI

10.1007/s00894-019-4075-7

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The local electronic structure of the Al=Al bond was studied in dialumene and derivatives of dialumene in which the Al atoms were substituted by B, Ga, or In atoms. DFT calculations were performed using the B3LYP, B3PW91, PBE0, M06-L, and M06-2X functionals. Topological analysis of the electron localization function described the covalent bonds mentioned above using the disynaptic basins Vi=1,2(B,B), Vi=1,2(Al,Al), V(Ga,Ga), and Vi=1,2(In,In). The basin populations were smaller than 4 e, as expected for a double bond: B=B 2.97 e, Al=Al 3.44–3.5 e, Ga=Ga 3.58 e, and In=In 3.86 e. The Al=Al, Ga=Ga, and In=In bonds were found to be intermediate in character between single and double bonds. Topological analysis of the ρ(r) field for dialumene showed a non-nuclear attractor along the Al=Al bond, with a pseudoatom basin population of 0.937 e. NBO analysis suggested that a double bond occurred only in the molecules containing Al, Ga, or In atoms. The character of the Ga=Ga bond was observed to be strongly dependent on the effective core potential used in the calculations.

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/s00894-019-4075-7

Strona internetowa wydawcy

http://link.springer.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-13 21:13:55

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