

## Nature of bonding in substituted polyacetylene: a combined AIM-ELF analysis.

### Autorzy

Piotr Durlak

Krzysztof Mierzwicki

Zdzisław Latajka

Henryk Ratajczak

### Rok wydania

2010

### Czasopismo

Journal of Molecular  
Structure

### Numer woluminu

976

### Strony

392-396

### DOI

10.1016/j.molstruc.2010.03.080

### Kolekcja

Naukowa

### Język

Angielski

### Typ publikacji

Artykuł

### Streszczenie

Results of topological analysis of the electron density in the frameworks of the Bader's theory of Atoms-in-Molecules (AIM) and analysis of the Becke and Edgecombe Electron Localization Function (ELF) on fluorine- and sulphur-substituted polyacetylenes are reported. AIM method indicates the presence of additional interaction between atoms in side chains. The lack of valence, disynaptic attractor basins  $V(F,F')$  and  $V(S,S')$  in ELF analysis support the conclusions of AIM about closed-shell type of F–F and S–S interactions.

### Słowa kluczowe

Polyacetylene, AIM, ELF, Nature of bond

### Adres publiczny

[http://dx.doi.org/ 10.1016/j.molstruc.2010.03.080](http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2010.03.080)

### Strona internetowa wydawcy

<http://www.elsevier.com>