Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

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

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-03 15:01:19

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/flYeuD3.