

## The nature of inter- and intramolecular interactions in $F_2OXe \cdots HX$ ( $X=F, Cl, Br, I$ ) complexes.

### Autorzy

Emilia Makarewicz

Jan Lundell

Agnieszka J. Gordon

Sławomir Berski

### Rok wydania

2016

### Czasopismo

Journal of Molecular  
Modeling

### Numer woluminu

22

### Strony

119/1-119/11

### DOI

10.1007/s00894-016-2970-8

### Kolekcja

Naukowa

### Język

Angielski

### Typ publikacji

Artykuł

### Streszczenie

Electronic structure of the  $XeOF_2$  molecule and its two complexes with  $HX$  ( $X= F, Cl, Br, I$ ) molecules have been studied in the gas phase using quantum chemical topology methods: topological analysis of electron localization function (ELF), electron density,  $\rho(r)$ , reduced gradient of electron density  $|RDG(r)|$  in real space, and symmetry adapted perturbation theory (SAPT) in the Hilbert space. The wave function has been approximated by the MP2 and DFT methods, using APF-D, B3LYP, M062X, and B2PLYP functionals, with the dispersion correction as proposed by Grimme (GD3). For the  $Xe-F$  and  $Xe=O$  bonds in the isolated  $XeOF_2$  molecule, the bonding ELF-localization basins have not been observed. According to the ELF results, these interactions are not of covalent nature with shared electron density. There are two stable  $F_2OXe \cdots HF$  complexes. The first one is stabilized by the  $F-H \cdots F$  and  $Xe \cdots F$  interactions (type I) and the second by the  $F-H \cdots O$  hydrogen bond (type II). The SAPT analysis confirms the electrostatic term,  $E_{elst}^{(1)}$  and the induction energy,  $E_{ind}^{(2)}$  to be the major contributors to stabilizing both types of complexes.

### Słowa kluczowe

Electron localization function (ELF), Quantum chemical topology, SAPT, Noble gas complexes, xenon

## Licencja otwartego dostępu

---

### CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprawdzać, 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/s00894-016-2970-8>

Strona internetowa wydawcy

---

<http://link.springer.com>