Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

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, ρ(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···F and Xe···F interactions (type I) and the second by the F-H···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, 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/s00894-016-2970-8

Strona internetowa wydawcy

http://link.springer.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-15 02:35:37
Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/nWfqZua.