

The nature of multiple boron-nitrogen bonds studied using electron localization function (ELF), electron density (AIM), and natural bond orbital (NBO) methods.

Autorzy

Grzegorz Mierzwa

Agnieszka J. Gordon

Sławomir Berski

Rok wydania

2020

Czasopismo

Journal of Molecular
Modeling

Numer woluminu

26

Strony

136/1-136/23

DOI

10.1007/s00894-020-04374-9

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Local nature of the boron-nitrogen (BN) bonding with different formal multiplicities ($B\equiv N$, $B=N$, $B-N$) have been investigated for 25 experimentally established organoboron molecules in both real and the Hilbert space, using topological analysis of electron localization function (ELF), electron density (AIM), and natural bond orbital (NBO) method. Each BN bond has been represented (ELF) by the bonding disynaptic attractor $V(B,N)$, with the basin electron population between 5.72e and 1.83e, confirming possible existence of all the three bond types. A covalent character of bonding can be associated with the dative mechanism due to the $V(B,N)$ bonding basin formed mainly (91–96%) by the N electron density. Similarly, the NBO method shows 2-center natural orbitals, consisting largely of the hybrids from the N atom. The AIM analysis yields the features typical for shared ($H_{(3,-1)}(r) < 0$) and closed-shell ($\nabla^2\rho_{(3,-1)}(r) > 0$) interactions. The delocalization indices, describing electron exchanges between B and N quantum atoms, are smaller than 1.5, even for formally very short triple $B\equiv N$ bonds.

Słowa kluczowe

B-N, $B=N$, $B\equiv N$, chemical bond, Double bond, triple bond, ELF, electron localisation, Attractor, Basin

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/s00894-020-04374-9>

Strona internetowa wydawcy

<http://link.springer.com>