$CH^{\oplus}$ ··· Br-Y(Y=H, CCH, CN, NC)缺电子体系中Br原子参与的反向卤键相互作用

Inverse Halogen Bonds Interactions Involving Br Atom in the Electronic Deficiency Systems of $CH_3^{\oplus}$ ··· Br-Y (Y=H, CCH, CN, NC)

摘要点击 231 全文点击 113 投稿时间：2010-12-22 采用时间：2011-4-12

查看全文 查看/发表评论 下载PDF阅读器

doi: 10.1088/1674-0068/24/03/284-294

中文关键词 甲基正离子 缺电子体系 反向卤键 电子密度拓扑性质

英文关键词 $CH_3^{\oplus}$ Electronic deficiency system Inverse halogen bond Electron density topological property

基金项目

作者	单位	E-mail
刘艳芝*	天水师范学院生命科学与化学学院，天水741001；甘肃高校新型分子材料设计与功能省级重点实验室，天水74100	lyanzhi003@163.com
袁焜	天水师范学院生命科学与化学学院，天水741001；甘肃高校新型分子材料设计与功能省级重点实验室，天水74100	
吕玲玲	天水师范学院生命科学与化学学院，天水741001	
朱元成	天水师范学院生命科学与化学学院，天水741001；甘肃高校新型分子材料设计与功能省级重点实验室，天水74100	
唐慧安	天水师范学院生命科学与化学学院，天水741001；甘肃高校新型分子材料设计与功能省级重点实验室，天水74100	
左国防	天水师范学院生命科学与化学学院，天水741001；甘肃高校新型分子材料设计与功能省级重点实验室，天水74100	
李志锋	天水师范学院生命科学与化学学院，天水741001；甘肃高校新型分子材料设计与功能省级重点实验室，天水74100	

中文摘要

采用B3LYP/6-311++G(d,p)和MP2/6-311++G(d,p)理论方法研究了$CH_3^{\oplus}$···Br-Y(Y=H, CCH, CN, NC) 缺电子体系中Br参与的反向卤键(IXB)结构. 四个IXB复合物中，MP2/6-311++G(d,p)水平上考虑了基组叠加误差的分子间相互作用能分别为218.87, 219.48, 159.18和143.05 kJ/mol，相对稳定性的递增顺序$CH_3^{\oplus}$···BrCN

英文摘要

Inverse halogen bonds interactions involving Br in the electronic deficiency sys-tems of $CH_3^{\oplus}$···Br-Y (Y=H, CCH, CN, NC) have been investigated by B3LYP/6-311++G(d, p) and MP2/6-311++G(d, p) methods. The calculated interaction energies with basis set super-position error correction of the four IXBs com-plexes are 218.87, 219.48, 159.18, and 143.05 kJ/mol (MP2/6-311++G(d, p)), re-spectively. The relative stabilities of the four complexes increased in the order:$CH_3^{\oplus}$···BrCN3$^{\oplus}$···BrNC3$^{\oplus}$···BrH≈$CH_3^{\oplus}$···BrCCH. Natural bond orbital theory analysis and the chemical shifts calculation of the related atoms revealed that the charges flow from Br-Y to $CH_3^{\oplus}$. Here, the Br of Br-Y acts as both a halogen bond donor and an electron donor. Therefore, compared with conventional halogen bonds, the IXBs complexes formed between Br-Y and $CH_3^{\oplus}$. Atoms-in-molecules theory has been used to investigate the topological properties of the critical points of the four IXBs structures which have more covalent content.

Copyright@2007 IOPP

承办：中国科学技术大学 协办：中国科学院大连化学物理研究所
主管：中国科学技术协会 主办：中国物理学会 国际代理发行：英国物理学会

编辑部地址：安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话：0551-3601122 **Email**：cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计