

Elektronegativitet för atomer i molekyler

SND-ID: 2021-276-1. **Version:** 1. **DOI:** <https://doi.org/10.5878/k4b7-yw31>

Ladda ner data

LCBLYP_ATZ2P.zip (8.12 KB)

NH3.zip (325.92 MB)

Tillhörande dokumentation

readme.txt (2.1 KB)

Ladda ner alla filer

2021-276-1-1.zip (~325.93 MB)

Citering

Racioppi, S., & Rahm, M. (2021) Elektronegativitet för atomer i molekyler (Version 1) [Dataset]. Chalmers tekniska högskola. Tillgänglig via: <https://doi.org/10.5878/k4b7-yw31>

Skapare/primärforskare

[Stefano Racioppi](#) - Chalmers tekniska högskola

[Martin Rahm](#) - Chalmers tekniska högskola

Forskningshuvudman

[Chalmers tekniska högskola](#) - Institutionen för kemi och kemiteknik

Beskrivning

Målet med denna studie är att undersöka elektronegativitet och laddning av atomer inuti molekyler. Dessa egenskaper har beräknats genom topologisk analys av den tredimensionella representationen av elektronernas energitäthet. Denna samling data innefattar kartesiska koordinater från molekylära beräkningar utförda med ADF och vågfunktioner av kvalitén LC-BLYP/ATZ2P. En fullständig upplaga av beräkningsresultatsfiler är bifogat för ett exempel, ammonia, NH₃. NH₃-exemplet innehåller även filer (av typen .cube) som använts för den topologiska analysen.

Data innefattar personuppgifter

Nej

Språk

[Engelska](#)

Dataformat / datastruktur

[Övrigt](#)

Ansvarig institution/enhet

Institutionen för kemi och kemiteknik

Forskningsområde

[Teoretisk kemi](#) (Standard för svensk indelning av forskningsämnen 2011)

Nyckelord

[Small molecules](#), [Electronegativity](#), [Adf](#)

Publikationer

Racioppi, S. and Rahm, M. (2021), In Situ Electronegativity and the Bridging of Chemical Bonding Concepts. Chem. Eur. J.. Accepted Author Manuscript. <https://doi.org/10.1002/chem.202103477>

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202103477>

Tillgänglighetsnivå

Åtkomst till data via SND

Data är fritt tillgängliga

Användning av data

[Att tänka på vid användning av data som delas via SND](#)

Versioner

Version 1. 2021-10-20

Ladda ner metadata

[DataCite](#)

[DDI 2.5](#)

[DDI 3.3](#)

[DCAT-AP-SE 2.0](#)

[JSON-LD](#)

[PDF](#)

[Citation \(CSL\)](#)

[Filöversikt \(CSV\)](#)

Publicerad: 2021-10-20