

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Ανταγωνισμός ανάμεσα σε υδρογονικούς και χαλκογονικούς δεσμούς σε αλληλεπιδράσεις μεταξύ υβριδίων των χαλκογόνων

Σωτήρης Ξανθείας

Department of Chemistry, University of Washington, Seattle, WA 98195, USA

Advanced Computing, Mathematics and Data Division, Pacific Northwest National Laboratory,

902 Battelle Boulevard, P.O. Box 999, MS J7-10, Richland, WA 99352, USA

Computational and Theoretical Chemistry Institute (CTCI), Pacific Northwest National

Laboratory, Richland, WA 99352, USA

Οι υδρογονικοί δεσμοί είναι θεμελιώδεις στον καθορισμό των μακροσκοπικών ιδιοτήτων του νερού (H_2O) που είναι καταφανώς διαφορετικές (“ανώμαλα υψηλά” σημεία τήξης, βρασμού, κρίσιμο σημείο, μέγιστη πυκνότητα στους $4^\circ C$, κλπ.) από αυτές των υβριδίων των άλλων χαλκογόνων στοιχείων (H_2S , H_2Se , H_2Te). Ενώ τα μόρια του νερού σχηματίζουν μόνο δεσμούς υδρογόνου μεταξύ τους, τα υβρίδια των υπολοίπων χαλκογόνων στοιχείων (S, Se, Te) μπορούν να αλληλοεπιδράσουν μεταξύ τους είτε με υδρογονικούς, είτε με χαλκογενικούς δεσμούς. Οι ιδιότητες αυτών των νέων δεσμών που διέπουν τις αλληλεπιδράσεις των βαρέων στοιχείων της ομάδας 16 του περιοδικού πίνακα μπορούν να προσδιοριστούν από την ανάλυση της κυματοσυνάρτησης και των συνιστωσών της συνολικής αλληλεπίδρασης. Επιπρόσθετα, η ανάλυση των δονητικών υπέρυθρων φασμάτων αυτών των δεσμών αποκαλύπτει συγκεκριμένα ίχνη τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον πειραματικό τους προσδιορισμό. Η μοριακή εικόνα που προκύπτει από την ανάλυση των θεμελιωδών αλληλεπιδράσεων για τους υδρογονικούς δεσμούς δείχνει μια ποσοτική σχέση μεταξύ ενέργειας – δομής – φάσματος δεσμού, που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την ανάλυση των πειραματικών μετρήσεων και την χρησιμοποίησή τους στον προσδιορισμό της δομής του δεσμού σε μοριακό επίπεδο.

MP Hoffman and SS Xantheas, *Journal of the American Chemical Society* **147**, 11152-11171 (2025).

MP Hoffman and SS Xantheas, Michael Duncan Festschrift, *Journal of Physical Chemistry A* in press (2025);

<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5c06655>

MP Hoffman and SS Xantheas, *Journal of the American Chemical Society* under review (2025).

KM Herman and SS Xantheas, *Journal of the American Chemical Society* **147**, 29732 (2025).

MA Boyer, O Marsalek, JP Heindel, TE Markland, AB McCoy, and SS Xantheas, *Journal of Physical Chemistry Letters* **10**, 918 (2019).

GD Santis and SS Xantheas, *Journal of Chemical Physics* **162**, 044106 (2025).

GD Santis and SS Xantheas, *Journal of Chemical Physics* **162**, 244121 (2025).

GD Santis and SS Xantheas, Mark A. Johnson Festschrift, *Journal of Physical Chemistry A* **129**, 9930 (2025).