
On the physical role of exchange in intramolecular halogen-halogen interactions

Meziane Yahia-Ouahmed*¹, Laurent Joubert¹, and Vincent Tognetti^{†1}

¹Chimie Organique et Bioorganique : Reactivité et Analyse (COBRA) – CNRS : UMR6014, Institut National des Sciences Appliquées [INSA] - Rouen, Université de Rouen – Rue Tesniere - 76821 - Mont Saint Aignan, France

Résumé

Les liaisons halogène sont des liaisons dites ‘faibles’ dont l’importance ne fait plus aucun doute compte-tenu du rôle considérable qu’elles jouent dans les systèmes biologiques (interactions protéine-ligands, repliement des protéines...), les polymères, l’ingénierie des cristaux etc... Dans ce travail, nous avons étudié des interactions halogène-halogène intramoléculaires pour une série d’alcane halogénés CX₃-CX’₃ (X, X’ = F, Cl, Br), ceci par le biais d’une analyse topologique QTAIM3

Mots-Clés: liaison halogène, QTAIM, IQA

*Intervenant

[†]Auteur correspondant: vincent.tognetti@univ-rouen.fr