

Angewandte Addendum

Nach der kürzlichen Besprechung in *Chemical & Engineering News* (22. September, 2014, S. 10) wurden die Autoren dieser Zuschrift von Prof. Ibon Alkorta (Madrid, Spanien) und Prof. Steven R. Kass (Minneapolis, USA) auf frühere experimentelle^[1,2] und theoretische^[3,4] Arbeiten zu doppelionischen H-verbrückten Spezies in der Gasphase aufmerksam gemacht. Diese Studien beschäftigten sich mit etwas anderen Spezies (z. B. großen Peptidclustern), und der theoretische Schwerpunkt liegt nicht wie hier auf der Frage „What is H-bonding?“. Dennoch sind diese Arbeiten (ebenso wie ein bereits erwähnter kristallographischer Beweis für das Bicarbonat-Dimer^[5]) relevant als Versuch einer experimentellen und theoretischen Detektion und Charakterisierung von paradoxen „anti-electrostatic“ (oder „electrostatics-defying“^[3]) H-verbrückten Spezies, die bestehende empirische Modellierungsverfahren und Lehrmeinungen auf die Probe stellen.

Anti-Electrostatic Hydrogen Bonds

F. Weinhold,*

R. A. Klein _____ 11396–11399

Angew. Chem. 2014, 126

DOI: 10.1002/ange.201405812

-
- [1] S. W. Lee, J. L. Beauchamp, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **1999**, *10*, 347–351.
 - [2] L. Feketeova, R. A. J. O'Hair, *Chem. Commun.* **2008**, 4942–4944.
 - [3] S. R. Kass, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 13098–13099; A. Shokri, M. Ramezani, A. Fattahi, S. R. Kass, *J. Phys. Chem. A*, **2013**, *117*, 9252–9258.
 - [4] I. Mata, I. Alkorta, E. Molins, E. Espinosa, *ChemPhysChem* **2012**, *13*, 1421–1424.
 - [5] D. Braga, F. Grepioni, J. J. Novoa, *Chem. Commun.* **1998**, 1959–1960. Siehe auch die nachfolgenden Diskussionen: T. Steiner, *Chem. Commun.* **1999**, 2299–2300; M. Mascal, C. E. Marjo, A. J. Blake, *Chem. Commun.* **2000**, 1591–1592; P. Macchi, B. B. Iversen, A. Sironi, B. C. Chakoumakos, F. K. Larsen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2000**, *39*, 2719–2722; *Angew. Chem.* **2000**, *112*, 2831–2834.