ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

گروه جدیدی از پیوندهای هالوژنی که از برهمکنش حفره سیگما پیروی نمیکنند.

عنوان انگلیسی مقاله :

A new class of halogen bonds that avoids the σ-hole

ایران عرضه
مرجع مقالات
ترجمه شده

توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل

با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، اینجا کلیک نمایید.

ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

4. Conclusions

A series of strong halogen-bonded complexes $CH_3OCZCl^+\cdots Y$ have been investigated by the density functional theory calculations at the M05-2X/6-311++G(d,p) level of theory. In these complexes, the strong electron-withdrawing group $CH_3O^+=$ results in the C–Cl bond contraction and the formation of the C=Cl double bond and further the formation of a new class of halogen bonds with the type of C=Cl···Y. The existence of the C=Cl double bond is confirmed by both the molecular orbital analysis and the NBO analysis. The strength of this new class of halogen bonds is in the range of 90–120 kcal/mol, which is greatly beyond the so-called covalent limit. It is found that, unlike the conventional halogen bond with the type of X-Hal···Y, the geometry of this new class of halogen bonds is not determined by the halogen's positive σ-hole. NBO analyses show that there is a competition between the $n \rightarrow \sigma^*$ interaction and the $n \rightarrow \pi^*$ interaction and the correlation of the second-order perturbation stabilization energy for $n \rightarrow \pi^*$ interaction with the deviation angle of ∠C=Cl···Y is pretty good. These results indicate it is the $n \rightarrow \pi^*$ interaction that determines the geometry of this new class of halogen bonds. Crystal structure analyses provide further support for our theoretical prediction.

4.نتیجه گیری

یکسری از کمپلکسهای هالوژنی قوی $CH3OCZCl^+\ldots Y^-$ با تئوری تابعیت چگالی وروش M05-2X/6-311++G(d,p) دراین مقاله مورد بررسی قرار گرفتند. در این کمپلکسها گروههای الکترون کشنده قوی مثل $CH3O^+=$ سبب میشوند پیوند C-Cl کوتاهتر شده و به پیوند دوگانه C=Cl تبدیل شود وباعث تشکیل گروه جدیدی ازکمپلکسهای پیوند هالوژنی ازنوع C=Cl…Y گردد. وجود پیوند دوگانه C=Cl هم توسط روش آنالیز اربیتال مولکولی وهم آنالیز NBO تایید میگردد. قدرت این گروه جدید از پیوندهای هالوژنی در محدوده 90 تا 120 کیلوکالری برمول است که فراتر از قدرت پیوندهای کووالانسی است. ما دریافته ایم که برخلاف پیوندهای هالوژنی مرسوم X-Hal…Y، ساختار هندسی این گروه جدید از پیوندهای هالوژنی ، باحفره سیگما مثبت هالوژنی تعیین نمیگردد. آنالیزهای NBO نشان میدهند که در این پیوندهای هالوژنی بین برهمکنش $n \rightarrow \pi^*$ و $n \rightarrow s^*$ رقابت وجود دارد و همچنین بین انرژی پایداری اختلالی مرتبه دوم برهمکنش $n \rightarrow \pi^*$ و زاویه انحراف C=Cl…Y، همبستگی بسیار خوبی دیده میشود. این نتایج براین نکته اشاره میکنند که در این دسته جدیداز پیوندهای هالوژنی، برهمکنش $n \rightarrow \pi^*$ تعیین کننده ساختار هندسی کمپلکسها میباشد. روشهای آنالیز ساختار کریستالی ، صحت پیش بینیهای نظری مارا بیشتر تایید میکنند.

ایران عرضه
مرجع مقالات
ترجمه شده

توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، اینجا کلیک نمایید.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، اینجا کلیک نمایید.