ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

رقابت و اثر متقابل بین برهمکنشهای حفره-سیگما و حفره-پای .
مطالعه ای محاسباتی بر روی کمپلکسهایی با نسبت 1:1 و 1:2
بین نیتریل هالیدها (O2NX) و آمونیاک.

عنوان انگلیسی مقاله :

Competition and Interplay between Interactions: A Computational Study of 1:1 and 1:2 Complexes of Nitryl Halide (O2NX) with Ammonia

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

The equilibrium structures, vibrational frequencies, and cooperative effects on the properties of the 1:1 and 1:2 nitryl halide–ammonia complexes have been studied. Two config-urations have been considered for the 1:1 complexes where the ammonia acts as an electron donor toward the σ-hole of the halogen atom of the nitryl halide (configuration I) and toward the π-hole of the nitrogen of NO_2X molecule (configuration II). The complexes via σ-hole interaction are more strongly bonded than those via π-hole interaction (the exceptions are the O_2NCl complexes). These results can be explained using the NBO and AIM analysis. The complexation is associated to a red shift or blue shift of the N–X bond stretching frequency of the NO_2X molecule as it engages respectively in N–X···N and N···N interactions in the 1:1 complexes. The magnitude of red shift ranges between 48 and 58 cm^{-1} for the 1:1 complexes and lies between 34 and 73 cm^{-1} for the 1:2 complexes. The N–X stretching frequency is shifted to the blue between 24 and 43 cm^{-1}.

4.نتیجه گیری

ساختارهای تعادلی، فرکانسهای ارتعاشی و اثرات شراکتی برهمکنشهای سیگما و پای، برروی ویژگیهای کمپلکسهای 1:1 و 1:2 نیتریل هالید-آمونیاک بررسی شده اند. دو نوع ایزومر پیکربندی برای کمپلکسهای 1:1 شناسایی شده اند در یکی از این ایزومرها آمونیاک بعنوان گروه دهنده الکترون به حفره سیگمای اتم هالوژن نیتریل هالید (ایزومر نوع I) عمل میکند و در دیگری آمونیاک الکترونهای خود را در اختیار حفره پای اتم نیتروژن مولکول نیتریل هالید NO2X قرار میدهد (ایزومر نوع II) . کمپلکسها از طریق برهمکنش حفره سیگما نسبت به برهمکنش حفره پای پیوندهای قویتری می توانند تشکیل دهند (البته بجز برای نیتریل کلرید NO2Cl) . این نتایج با استفاده از تئوریهای AIM و NBO قابل توصیف هستند. تشکیل کمپلکس با شیفت قرمز یا آبی فرکانس کششی پیوند N-X مولکول NO2X همراه خواهد بود بطوریکه این فرکانس به ترتیب برهمکنشهای N-X...N و N...N را در کمپلکسهای 1:1 درگیر میکند. مقدار شیفت قرمز فرکانس کششی پیوند N-X برای کمپلکسهای 1:1 در محدوده $48\ cm^{-1}$ تا $58cm^{-1}$ و برای کمپلکسهای 1:2 در محدوده $34\ cm^{-1}$ تا $73cm^{-1}$ قرار میگیرند. فرکانس کششی پیوند N-X از $24cm^{-1}$ تا $43cm^{-1}$ به سمت ناحیه آبی شیفت پیدا میکند.

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.