



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

در خصوص خاصیت کووالانسی برهمکنشهای پیوندی گازهای نجیب:
نوع جدیدی از برهمکنشهای ضعیف

عنوان انگلیسی مقاله :

On the Covalent Character of Rare Gas Bonding Interactions:
A New Kind of Weak Interaction



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.



بخشی از ترجمه مقاله

CONCLUSIONS

In this work a number of rare gas bonds, which range from covalent to weak interactions, have been studied at the high-accuracy relativistic AQCC level of theory, mainly by QTAIM with more comprehensive criteria and NBO. The results show that QTAIM (but not including its derivatives, such as QTAIM charge, QTAIM bond order, and so on) is a powerful utility and is universal for the unusual rare gas bonds. In addition, the second-order perturbation theory analysis based on NBO reveals that RgMF and RgBeO have different bonding mechanism.

It was found that most of the Rg–M (M = Cu, Ag, Au, Pt) bonds and all the Rg–Be bonds belong to weak interactions instead of covalent or vdW ones. Our analyses also suggest that, in addition to the known hydrogen bonds, lithium bonds, and halogen bonds,⁵³ rare gas bonds may be a new kind of weak bonding interaction.

نتیجه گیری

در این مقاله تعدادی از پیوندهای گاز نجیب که در محدوده برهمکنشهای کووالانسی تا برهمکنشهای ضعیف قرار میگیرند، در سطح نظری بسیار دقیق نسبی AQCC بر مبنای معیارهای جامع نظریه QTAIM ارائه شده توسط "بیدر" و نظریه NBO مطالعه میشوند. نتایج نشان میدهند که نظریه QTAIM (بدون در نظر گرفتن مشتقات این نظریه همچون بار الکترونی QTAIM، مرتبه پیوند QTAIM و غیره)، ابزاری قدرتمند و جامع برای بررسی پیوندهای غیرمعمول گازهای نجیب میباشد. همچنین آنالیز نظریه اختلالی مرتبه دوم بر مبنای نظریه NBO، نشان میدهند که ترکیبات RgMF و RgBeO مکانیسمهای پیوندی متفاوتی دارند. ثابت شده که اکثر پیوندهای Rg-M (M=Cu,Ag,Au,Pt) و تمام پیوندهای Rg-Be بجای قرار گرفتن در زمره پیوندهای کووالانسی و واندروالسی، در گروه برهمکنشهای پیوندی ضعیف جای میگیرند. بررسی های ما همچنین نشان میدهند که علاوه بر پیوندهای هیدروژنی، پیوندهای لیتیومی و پیوندهای هالوژنی شناخته شده، پیوندهای گازهای نجیب نیز ممکن است نوع جدیدی از برهمکنشهای پیوندی ضعیف باشند.



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.