



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

مطالعه نظری دیم‌های HXYH (X,Y=O, S, Se) ، پیوند هیدروژنی و
برهمکنش‌های کالکوژن-کالکوژن

عنوان انگلیسی مقاله :

RESEARCH ARTICLE Theoretical study of the HXYH
dimers (X, Y ^O, S, Se). Hydrogen bonding and
chalcogen–chalcogen interactions



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

4. Conclusions

A theoretical study of the monomers and dimers formed by the chiral HXYH molecules, where X, Y = O, S and Se (except X=Y = O), have been carried out using MP2/6-311++G(d,p) level computational level. A large number of minima are found for each case (between 13 and 22). Both homochiral and heterochiral complexes are characterized. In general, small chiral discrimination was found for pairs of complexes with the same interaction type.

The most stable minima are those formed through HB interactions, especially if OH groups are involved. However, as the size of the atoms interacting increases, the chalcogen-chalcogen forces become more important.

4. نتیجه گیری

در این مقاله مطالعه ای نظری بر روی منومرها و دیمرها تشکیل شده از مولکولهای کایرال HXYH که در آن X,Y=O,S,Se بجز در مورد (X,Y=O) در تراز محاسباتی MP2/6-311++G(d,p) انجام شده است. در هر مورد تعداد زیادی مینیمم یافت شده است (بین 13 تا 22 عدد در هر مورد). هر دو نوع کمپلکس هموکایرال و هترو کایرال شناسایی شده اند. در کل، جداسازی کایرال کوچکی برای جفت کمپلکسهایی با برهمکنشی از نوع مشابه نتیجه شده است.

پایدارترین مینیممها آنهایی هستند که برهمکنش پیوند هیدروژنی داشته باشند بویژه اگر گروههای OH در برهمکنش درگیر باشند. زمانیکه اندازه اتمهای برهمکنش کننده افزایش می یابد، نیروهای کالکوژن-کالکوژن اهمیت بیشتری پیدا می کنند.



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.