



## بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

پیوندهای هیدروژنی غیر معمول -  $F-H \cdots \pi$  مطالعه روشهای آغازین و نظریه  
اتمها در مولکولها AIM

عنوان انگلیسی مقاله :

Unconventional  $F-H \cdots \pi$  hydrogen bonds — ab initio  
and AIM study



### 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. Summary

The main conclusions of this study concern the characteristics of  $F-H\cdots\pi$  unconventional H-bonds. We do not observe the typical correlation between binding energy and proton-acceptor distance, which is known for conventional systems. Strictly speaking, the topological parameters describe better the H-bond strength than the corresponding geometrical parameters. Additionally, the parameters of proton donating bond (HF in the case of the sample considered here) correlate better with binding energy than the parameters of  $H\cdots\pi$  contact. It is in line with previous findings [14,20,22] that the parameters of Lewis acid within complexes may be good descriptors of H-bond strength. The strength of H-bond for some of  $F-H\cdots\pi$  systems indicates that such interactions may be dominant in determining crystal packing.

## 4. خلاصه مطلب

نتیجه اصلی این مقاله به مشخصات پیوند هیدروژنی غیر متداول  $F-H\cdots\pi$  برمیگردد. بین انرژی پیوندی و طول پیوند پذیرنده - پروتون همبستگی وجود دارد که تنها برای سیستمهای هیدروژنی متداول مشاهده میشود. بطور قطع پارامترهای توپولوژیکی، قدرت پیوند هیدروژنی را نسبت به پارامترهای ساختاری بهتر توصیف می کنند. علاوه بر این پارامترهای پیوند دهنده پروتون (مولکول HF در مورد گونه های بررسی شده در این مقاله) نسبت به پارامترهای برهمکنش  $H\cdots\pi$ ، همبستگی بهتری با انرژی پیوندی نشان میدهند. این نتیجه مطابق نتیجه مطالعات پیشین است که در آن پارامترهای اسید لوئیس در یک کمپلکس ممکن است توصیف کنندگان خوبی از قدرت پیوند هیدروژنی باشند. قدرت پیوند هیدروژنی در برخی از سیستمهای  $F-H\cdots\pi$  نشان میدهند که چنین برهمکنشهایی ممکن است در تعیین ساختار بلوری، تعیین کننده 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.