



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

مطالعات نظری بر روی ماهیت پیوندی کمپلکسهای حفره سیگما

عنوان انگلیسی مقاله :

Theoretical studies on the nature of bonding in σ -hole complexes



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

In the present study, interactions between NH_3 , H_2O and HF as nucleophile and molecules containing σ -hole atom of groups V-VII have been theoretically investigated. Geometrical, energetic, AIM topological parameters and NBO analysis are our tools to study the nature of interactions. It was found that electrostatic potential $V_{s,max}$ plays essential role in formation of σ -hole bond. Therefore, depending on the value of electrostatic potential one or multi hydrogen bonds can be formed parallel to σ -hole bonding. The highly directional nature of σ -hole bonding indicates that it is electrostatically dominant. Our results reveal that NH_3 acts as a stronger nucleophile than H_2O and HF . The NBO analysis show that the X-Y covalent bond stretching is in correlation with the strength of σ -hole. According to the obtained results for the com-plexes studied here, charge-transfer interaction between lone pair on Z and X-Y σ^* orbitals leading to increase in the population of σ^* and elongate the X-Y bond.

4. نتیجه گیری

در این مقاله برهمکنشهای بین HF ، H_2O ، NH_3 به عنوان نوکلئوفیل با مولکولهای شامل اتمهای حفره سیگما در گروههای 5 تا 7 جدول تناوبی از لحاظ نظری بررسی شده اند. آنالیز ساختار هندسی، انرژی و پارامترهای توپولوژیکی AIM و آنالیز NBO ابزار کاربردی ما برای مطالعه ماهیت این برهمکنشها هستند. در این مطالعات این نتیجه حاصل شده است که پتانسیل الکتروستاتیک $V_{s,max}$ نقشی اساسی در تشکیل پیوند حفره سیگما ایفا میکند. بنابراین بسته به مقدار پتانسیل الکتروستاتیک، یک پیوند هیدروژنی واحد یا چند پیوند هیدروژنی همزمان با پیوند حفره سیگما تشکیل میشوند. ماهیت راستخط بودن تشکیل پیوند حفره سیگما نشان میدهد که نیروهای الکتروستاتیک در این پیوندها بر دیگر نیروها غالب هستند. نتایج ما در این مقاله نشان میدهند که نوکلئوفیل NH_3 نسبت به H_2O و HF نوکلئوفیل قویتری است. آنالیز NBO نیز نشان میدهد که کشش پیوند کووالانسی X-Y با قدرت پیوند حفره سیگما همبسته است. طبق نتایج بدست آمده برای کمپلکسهای مطالعه شده در این مقاله برهمکنشهای انتقال بار بین جفت الکترون تنهای اتم Z و اربیتالهای ضدپیوندی σ^* پیوند X-Y موجب افزایش جمعیت اربیتال σ^* و کشیدگی بیشتر پیوند X-Y میگردد.

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.

