ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

دهیدروژناسیون لیتیوم هیدرازینیدوبوران: دیدگاه تحلیل محاسباتی

عنوان انگلیسی مقاله :

Dehydrogenation of lithium hydrazinidoborane:

Insight from computational analysis

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

Pathways for H_2 release from dimer $(LiN_2H_3BH_3)_2$

As the interaction between the two monomeric units of $LiN_2H_3BH_3$ may lead to lower energy pathways, we have considered the possible reaction pathways generated from the dimer and constructed the corresponding potential energy surfaces (PESs) depicted in Figs. 6 and 7 respectively. We have found the two stable dimers of $LiN_2H_3BH_3$ namely d1 and d2 respectively. The dimer d2 has complexation energy of −16.6 kcal/mol and is formed mainly due to the interaction of one lithium of one monomer with the two Hs attached to boron of other monomer. On the other hand, dimer d1 is found to be more stable due to its more negative complexation energy (−45.5 kcal/mol) compared to dimer d2. Lithium of each monomeric unit in dimer d1 interacts with the nitrogen of another monomer, thereby forming a stable ring structure with the N backbones and the two lithium atoms. It is noteworthy that the monomeric unit present in these two dimers is R1. The possible H_2 release pathways from these two isomers are detailed in the following section.

مسیرهای رهایش H2 از دایمر $(LiN_2H_3BH_3)_2$

از آنجایی که میانکنش بین دو واحد مونومری LiN2H3BH3 ممکن است منجر به مسیرهای کم انرژی تر شود، ما مسیرهای محتمل را که از دایمر منشا می‌گیرد در نظر گرفتیم و سطوح انرژی پتانسیل (PESs) را که به ترتیب در شکل ۶ و ۷ نشان داده شده . ما دریافته‌ایم که دو دایمر پایدار LiN2H3BH3 به ترتیب به نام d1 و d2 هستند. دایمر d2 انژی تشکیل 16.6 kcal/mol- دارد و غالبا بر اثر میانکنش یک لیتیوم از یک مونومر با دو هیدروژن متصل شده به بورون مونومر دیگر تشکیل می‌شود. از طرف دیگر، دایمر d1 به علت انرژی تشکیل منفی‌ترش (45.5 kcal/mol-) در قیاس با دایمر d2 پایدارتر است.لیتیوم هر واحد مونومری در دایمر d1 با نیتروژن مونومر دیگر میانکنش می‌کند و به این ترتیب یک ساختار حلقه‌ای پایدار را با اسکلت N و دو اتم لیتیوم تشکیل می‌دهد. شایان ذکر است که واحد مونومری موجود در این دو وایمر R1 است. مسیرهای احتمالی رهایش H2 از این دو ایزومر در بخش زیربا جزئیات بیان شدند.

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.