



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

پیوند هالوژنی: حفره سیگما

عنوان انگلیسی مقاله :

Halogen bonding: the σ -hole



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

Summary

Halogen bonding involves iodine, bromine and sometimes chlorine, typically substituted in molecular environments that are electron-withdrawing. The three pairs of unshared electrons on the halogen atom X form a belt of negative electrostatic potential around its central region, leaving a positive “ σ -hole” on the outermost portion of its surface, centered around the R–X axis. This σ -hole can interact favorably with negative sites on other molecules, giving rise to halogen bonding.

If the electron-attracting power of X is greater than that of the remainder of its molecule (R), then the halogen atom may gain enough electronic charge to neutralize the σ -hole.

This result is also promoted by *sp*-hybridization of the unshared *s*-valence electrons of X. Both factors are operative when X = F, which explains why fluorine does not participate in halogen bonding.

خلاصه

پیوندهای هالوژنی شامل پیوندهایی هستند که در آنها اتمهای ید، برم و گاهی نیز کلر در مولکولهایی با گروههای الکترون کشنده استخلاف شده اند. سه جفت الکترون غیرپیوندی اتم هالوژن X یک کمربند با پتانسیل الکتروستاتیک منفی حول ناحیه مرکزی اتم و یک حفره سیگما در بیرونی ترین بخش سطح اتم حول محور R – X تشکیل میدهند. این حفره سیگما میتواند با نواحی منفی برهمکنش کند و پیوند هالوژنی را تقویت کند. اگر قدرت الکترون کشندگی اتم X از بقیه اتمهای مولکول بیشتر باشد در اینصورت اتم هالوژن میتواند بار الکترونی کافی را برای خنثی سازی حفره سیگما در اختیار این ناحیه قرار دهد. این نتیجه با هیبریداسیون *sp* الکترونها غیرپیوندی لایه *s* والانس اتم X تقویت میشود. هر دو فاکتور وقتی X = F باشد کاربرد زیادی دارند و این مطلب میتواند توضیح دهد که چرا فلورین در پیوند هالوژنی مشارکت نمیکند.



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.