



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

ماهیت پیوند هالوژنی: مطالعه ای براساس تحلیل توپولوژیکی لاپلاسین
دانسیته بار الکترونی و آنالیز تفکیک انرژی

عنوان انگلیسی مقاله :

Nature of halogen bonding. A study based on the topological
analysis of the Laplacian of the electron charge density and an
energy decomposition analysis



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

Conclusions

This work, carried out on a set of complexes within a wide range of variation of binding energy (from 1.27 to 27.62 kcal/mol), highlights the utility of the topological analysis of the charge density and of the $L(r)$ function, in conjunction with energy decomposition analysis as a methodology to investigate the nature of the halogen bonds. Based on the energy decomposition analysis, we have found that the electrostatic and the charge transference (in minor measure) components have the most significant contributions to the total interaction energy *-in all ranges of strength-* of the complexes analyzed here and play a substantial role in determining the optimal geometry of the complexes.

نتیجه گیری

این کار که بر روی یک مجموعه از مجموعه ها در طیف گسترده ای از تغییر انرژی اتصال (از 1.27 به 27.62 kcal/mol) انجام شده است، کاربرد تجزیه توپولوژیک از چگالی شارژ و عملکرد $L(r)$ در رابطه با تجزیه انرژی به عنوان یک روش برای بررسی ماهیت هالوژن را نشان می دهد. بر اساس تجزیه انرژی، ما دریافتیم که الکترواستاتیک و انتقال بار (در مقیاس جزئی)، مهم ترین سهم را در انرژی کل تعامل در همه محدوده های قدرت از مجموعه های تجزیه و تحلیل شده در تعیین هندسه بهینه بازی میکند.



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.