



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

ماهیت شیمیایی پیوندهای هیدروژنی بسیار قوی در دسته ای از ترکیبات

عنوان انگلیسی مقاله :

The chemical nature of very strong hydrogen bonds in some
categories of compounds



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. Conclusion

A topological analysis of electron density of RAHBs and (\pm)CAHBs at B3LYP/6-311++G** level of theory, indicates that these hydrogen bonds are partially covalent. The covalent character of H-bond, with the criterion of absolute value of $H(r)$, is increased with π -delocalization and is proportional to stabilization energy and charge transfer from oxygen lone pairs to anti bonding NBO of O-H. From Table 2, an acceptable correlation can be seen in $H(r)$ vs. $\rho(r)$ and 'H-bond energy' vs. $\rho(r)$. Also, it is revealed that the covalent character of O...H bond increases as this character decreases for O-H bond.

4. نتیجه گیری

آنالیز توپولوژیکی دانسیته الکترونی گروهی از پیوندهای هیدروژنی شامل RAHB ها و (\pm)CAHB ها در تراز محاسباتی B3LYP/6-311++G** نشان میدهد که این پیوندهای هیدروژنی جزئی کووالانسی هستند. مشخصه کووالانسی پیوند هیدروژنی با مقیاس مقدار مطلق دانسیته انرژی کل $H(r)$ ، با عدم استقرار الکترونی π افزایش می یابد و با انرژی پایداری و انتقال بار جفت الکترونیهای تنهای اکسیژن به ارییتال NBO ضدپیوندی O-H متناسب است. از جدول 2 همبستگی قابل قبولی برای پارامتر توپولوژیکی $H(r)$ برحسب $\rho(r)$ و اختلاف انرژی پیوند هیدروژنی برحسب $\rho(r)$ مشاهده میشود. واضح است که وقتی مشخصه کووالانسی پیوند O-H کاهش می یابد، مشخصه کووالانسی پیوند O...H افزایش می یابد.



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.