



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

مطالعه مقایسه ای بر روی ماهیت و قدرت پیوندهای O-O ، S-S ، Se-Se

عنوان انگلیسی مقاله :

A comparative study on the nature and strength of O–O, S–S, and
Se–Se bond



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

6. Conclusions

In the present study, a number of theoretical methods have been employed to understand nature, strength and reactivity of dihydrogen dichalcogenides (chalcogen = O, S, Se) and their methyl and amino derivatives. The X-X rotational barriers through TS1 decrease in the order of X as $O > S > Se$. The barrier to rotation through TS2 is smaller than the values for similar rotation through TS1. The difference in the rotational barriers has been assigned to repulsive interactions of lone pairs and bond pairs in eclipsed orientation. The X-X BDE values decrease in the order $S-S > Se-Se > O-O$. The X-X BDE increase in dimethyl dichalcogenides while the values decrease in diaminedichalcogenides.

6. نتایج

در این مقاله تعدادی روش نظری برای فهم ماهیت، قدرت و واکنشپذیری دی کالکوژنیدهای دی هیدروژنی (کالکوژن Se, S, O) و مشتقات متیل و آمین آنها استفاده شده است. سدهای چرخشی پیوند X-X از حالت گذار TS1 برای اتم X به ترتیب بصورت $O > S > Se$ کاهش مییابند. سد چرخش از حالت گذار TS2 از سد چرخش از حالت گذار TS1 کوتاهتر است. اختلاف در اندازه سدهای چرخشی به برهمکنش دافعه بین جفت الکترونها و جفت الکترونها پیوندی به صورتبندی متقابل (eclipsed) آنها مربوط میشود. مقادیر انرژی تفکیک پیوند BDE در پیوند X-X به ترتیب بصورت $S-S > Se-Se > O-O$ کاهش می یابند. مقدار BDE در مشتقات دی کالکوژنیدهای دی متیل افزایش مییابد در حالیکه این پارامتر در دی کالکوژنیدهای دی آمین کاهش 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.