ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

ساختارهای مولکولی و پتانسیلهای الکتروستاتیک سطوح مولکولی در سیستمهایی حاوی اتمهای C, N, H با چگالی بالا

عنوان انگلیسی مقاله :

Structures and Molecular Surface Electrostatic Potentials of High-Density C, N, H Systems

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

SUMMARY

We suggest that the high densities found crystallographically for **1–3** can be attributed to their relatively small molecular volumes and the strong intermolecular attractions arising from the highly varying electrostatic potentials on their molecular surfaces. Structures **3** and **4** can be involved in tautomeric equilibria with diazides, and in the gas phase, **3** is 5.2 kcal/mole more stable as the diazide, although in the crystal it exists only as the tetrazole. In the dinitro derivative of **3**, the energetic preference for the diazide tautomer is greatly enhanced, indicating that its usefulness as an energetic material is open to question.

خلاصه

ما نشان دادیم که چگالیهای بالایی که از روشهای محاسباتی کریستالوگرافی یا بلورشناسی برای ترکیبات 1تا3 اندازه گیری شده اند، با حجمهای نسبتاً کوچک آنها و جاذبه های بین مولکولی قوی ناشی شده از پتانسیلهای الکتروستاتیک بسیار متغیر آنها در سطوح مولکولی شان، مرتبط میباشد. مولکولهای 3 و4 میتوانند در تعادلات تاتومری با آزیدها مشارکت کنند و در فاز گازی ترکیب3 حدود 5.2کیلوکالری برمول بعنوان یک ترکیب آزید پایدارتر است گرچه در فاز جامد به شکل تترازول دیده میشود. در مشتق دی نیتروی ترکیب 3 ، سطح انرژی برای تاتومر دی آزید مطلوبتر است که اهمیت آن بعنوان یک ماده پرانرژی، زمینه ای را برای بحث و بررسی بیشتری برروی آن فراهم کرده است.

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.