



## بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

مطالعاتی بر روی ماهیت پیوند هالوژنی به انضمام آنالیز نظریه  
اختلالی تقارن پذیر

عنوان انگلیسی مقاله :

Investigations into the Nature of Halogen Bonding Including  
Symmetry Adapted Perturbation Theory Analyses



### 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

In this work we have performed HF, MP2, CCSD(T), NBO, SAPT, and DFT-SAPT calculations, using several large basis sets, on the (fluorinated and unfluorinated) halomethane-formaldehyde complexes. It is found that, as the halogen bonding halogen's size increases, the halogen bond becomes stronger and longer. SAPT analyses of halogen bonds in systems containing chlorine and bromine indicate that halogen bonding interactions involving these halogen atoms are principally dispersive in nature, although electrostatic contributions to halogen bonds are not negligible. The electrostatic contribution to the interaction energy in halogen bonding increases as the size of the halogen bonding halogen increases. The most dominant physical component of interactions for systems containing iodine is the electrostatic one, which accounts for slightly more than half of the total binding energy.

### نتیجه گیری

در این مقاله ما محاسبات HF, MP2, CCSD(T), NBO, SAPT, DFT-SAPT را با استفاده از چند مجموعه پایه بزرگ بر روی کمپلکسهای هالومتان (فلوئوردار و غیرفلوئوردار) انجام داده ایم. نتیجه ای که از این محاسبات گرفته میشود این است که همچنان که اتم هالوژن درگیر در پیوند هالوژنی بزرگتر میشود، پیوند هالوژنی قویتر و بلندتر میگردد. آنالیزهای SAPT در پیوندهای هالوژنی حاوی اتم کلر و برم، نشان میدهند که برهمکنشهای پیوند هالوژنی حاوی این دو اتم، اساساً ماهیتی از نوع نیروهای پراکندگی دارند گرچه از سهم نیروهای الکتروستاتیک نمیتوان غافل شد. سهم نیروی الکتروستاتیک در انرژی برهمکنش با افزایش اندازه اتم هالوژن درگیر در پیوند هالوژنی 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.