ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

# بخشی از ترجمه مقاله

## عنوان فارسی مقاله :

مطالعات روشهای آغازین و نظریه AIM بر روی میزان قدرت پیوند هیدروژنی کمپلکسهای R-CòN…HF و R-CòN…HCl

## عنوان انگلیسی مقاله :

Ab initio and AIM studies on measures of hydrogen bonding strength—R–CxN· · ·HF and R–CxN· · ·HCl complexes

## 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

**4. Conclusions**

The values of binding energies (Table 1) show that for R–C≡N· · ·HX complexes investigated here we may say about H-bonds of the mediate strength. The greatest binding energies are observed for the complexes with LiCN as a proton accepting molecule. We observe two subsamples for the sample of complexes: the first one with HF molecule as a proton

donating species and the second one with HCl molecule. Such situation is connected with the parameters of the proton donating bond as those used to describe the H-bond strength. However, if we apply the normalized parameters, $\Delta$-parameters or the electronic density at H· · ·N BCP ($\rho_{H\cdots N}$) they may be treated as measures of H-bond strength for the whole sample. In other words they may be applied for heterogeneous samples. Factor analysis shows that all variables used for describing the H-bond are strictly correlated and can then be equally used to describe the properties of H-bonds.

**4.نتیجه گیری**

از روی مقادیر انرژیهای پیوندی (جدول1) کمپلکسهای R-CôN…HX مطالعه شده در این مقاله، میتوان گفت قدرت پیوند هیدروژنی این کمپلکسها در حد متوسط است. بیشترین انرژیهای پیوندی برای کمپلکسهایی با LiCN بعنوان یک مولکول پذیرنده پروتون مشاهده میشود. ما اثر دو سیستم فرعی را برروی تمام کمپلکسها بررسی کردیم : اولین ان، یک مولکول پروتون دهنده بنام HF و گونه دوم مولکول HCl میباشد. در چنین حالتی، پارامترها براساس گونه دهنده پروتون، برای تخمین قدرت پیوند هیدروژنی استفاده میشوند. درهر صورت اگر ما پارامترهای بهنجارشدهٔ $\Delta$ و یا دانسیته الکترونی در نقطه بحرانی پیوند H…N ، $(\rho H \ldots N)$ را بکار ببریم، این پارامترها ممکن است بعنوان معیاری برای تخمین قدرت پیوند هیدروژنی تمام کمپلکسها استفاده شوند. بعبارت دیگر این پارامترها ممکن است برای نمونه های هیدروژنی ناهمسان بکار روند. روش تحلیل عاملی نشان میدهد همه متغیرهایی که برای توصیف پیوند هیدروژنی استفاده میشوند بسیار همبسته هستند و میتوانند بطور یکسان، برای توصیف خواص پیوندهای هیدروژنی استفاده شوند.

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.