بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

سطوح انرژی پتانسیل تصحیح شده به روش متقابل از نظر خطای برهم نهی مجموعه پایه. کاربرد برای کمپلکسهای هیدروژن پروکسید

(X= F^-, Cl^-, Br^-, Li^+ , Na^+) X ...

عنوان انگلیسی مقاله :

Basis set superposition error-counterpoise corrected potential energy surfaces. Application to hydrogen peroxide ...X(X=F-,Cl-, Br-,Li+,Na+…) 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

V. CONCLUSION

Five new HP complexes have been characterized at the B3LYP/6-311+ G(3*df* ,2*p*) and MP2(full)/6-311 +G(3*df* ,2*p*). The levels and basis set used were adequate, given the small BSSE obtained. The computed binding energies of the complexes yielded medium to strong hydrogen-bond interactions for **1**–**3** and strong electrostatic interac-tions for **4** and **5**. The results obtained at both levels were highly similar, showing that the DFT B3LYP model is a good choice for medium intermolecular interactions. The BSSE-counterpoise corrected PES geometry minima were calculated, giving values very similar to the uncorrected ones. These results were compatible with the small BSSE errors found. The application of the counterpoise corrected PES method has shown its utility in describing the intermo-lecular vibrational modes, and will be particularly useful for systems where the BSSE is difficult to reduce (large systems and medium basis sets with correlated methods).

5.نتیجه گیری

5 کمپلکس جدید در سطوح محاسباتی B3LYP/6-311+G(3df.2p) و MP2/6-311+G(3df,2p) دراین مقاله بررسی میشوند. سطوح محاسباتی و مجموعه پایه استفاده شده به جهت خطای برهم نهی کوچکی که نتیجه میدهند مناسب میباشند. انرژیهای پیوندی محاسبه شده برای کمپلکسهای آنیونی 1تا3، برهمکنشهای هیدروژنی متوسط تا قوی را نمایش میدهند و درکمپلکسهای کاتیونی 4و5 برهمکنش از نوع الکتروستاتیک قوی میباشد. نتایج بدست آمده در هر دو سطح محاسباتی بسیار شبیه یکدیگر بوده که نشاندهنده این است که روش محاسباتی B3LYP که زیرمجموعه روش تابعیت چگالی DFT میباشد، انتخاب مناسبی برای بررسی برهمکنشهای بین مولکولی متوسط میباشد. مینیمم های ساختاری سطح انرژی پتانسیل تصحیح شده از نظر خطای برهم نهی مجموعه پایه به روش تصحیح متقابل، محاسبه گردیدند و مقدار آنها بسیار شبیه مینیممهای ساختاری سطوح انرژی پتانسیل تصحیح نشده بدست می آید. این نتایج با مقادیر خطای BSSE کوچک محاسبه شده، همخوانی دارند. کارایی روش PES تصحیح شده سودمندی این روش را در توصیف مدهای ارتعاشی بین مولکولی نشان داده است و بویژه برای سیستمهایی که کاهش BSSE آنها بسیار مشکل میباشد (سیستمهای بزرگ و مجموعه پایه های متوسط با روشهای همبسته الکترونی) مفید میباشند.

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.