



## بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

برهمکنشهای کالکوژن - کالکوژن درون مولکولی رزونانس پذیر؟

عنوان انگلیسی مقاله :

Resonance-Assisted Intramolecular Chalcogen - Chalcogen  
Interactions?



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

## Conclusion

Our results indicate that in  $\text{CH}(\text{X})\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{YH}$  ( $\text{X}=\text{Y}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$ ) the  $\text{X-H}\cdots\text{X}$  IHB competes in strength with the  $\text{X}\cdots\text{XH}$  chalcogen-chalcogen interaction, while the opposite is found for the corresponding tellurium-containing analogues.

For those derivatives in which  $\text{X}\neq\text{Y}$  the situation is more complicated due to the existence of two non-equivalent  $\text{X-H}$  and  $\text{Y-H}$  tautomers. The  $\text{Y-H}$  tautomer is found to be lower in energy than the  $\text{X-H}$  tautomer, independently of the nature of  $\text{X}$  and  $\text{Y}$ . For  $\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$  and  $\text{Y}=\text{S}, \text{Se}$  the most stable conformer **b** is the one exhibiting a  $\text{Y-H}\cdots\text{X}$  IHB. Conversely when  $\text{Y}=\text{Te}$ , conformer **d**, stabilized through a  $\text{X}\cdots\text{YH}$  chalcogen-chalcogen interaction is the global minimum of the PES.

## نتیجه گیری

نتایج ما نشان میدهند که در ترکیب  $\text{CH}(\text{X})\text{-CH}_2\text{CH}_2\text{YH}$  ( $\text{X}=\text{Y}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$ )، پیوند هیدروژنی بین مولکولی  $\text{X-H}\cdots\text{X}$ ، از نظر قدرت پیوندی با برهمکنش کالکوژن-کالکوژن  $\text{X}\cdots\text{XH}$  رقابت میکند در صورتیکه خلاف این مطلب در مورد ترکیبات تلوریم دار مشاهده میشود.

در ترکیباتی که در آنها  $\text{X}\neq\text{Y}$  میباشد، بدلیل وجود دو تائومر  $\text{X-H}$  و  $\text{Y-H}$  مختلف، بررسیها پیچیده تر میشوند. مستقل از ماهیت اتمهای  $\text{X}$  و  $\text{Y}$ ، تائومر  $\text{Y-H}$  در سطح انرژی پایینتری نسبت به تائومر  $\text{X-H}$  قرار دارد. برای حالتیکه  $\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$  و  $\text{Y}=\text{S}, \text{Se}$  کنفورمر پایدار **b**، نمایشی از پیوند هیدروژنی درون مولکولی  $\text{Y-H}\cdots\text{X}$  میباشد. در مقابل وقتی  $\text{Y}=\text{Te}$  است، کنفورمر **d** با برهمکنش کالکوژن-کالکوژن  $\text{X}\cdots\text{YH}$  که در حداقل مطلق سطح انرژی پتانسل قرار دارد، پایدار میشود.

## 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.

