



## بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

ماهیت برهمکنش های غیرپیوندی بین سلنیم و گوگرد دو ظرفیتی:  
یک مطالعه نظری

عنوان انگلیسی مقاله :

The Nature of Nonbonded Interactions between Divalent  
Selenium and Sulfur: a Theoretical Investigation



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

## 4. Conclusions

The nature and the strength of Se···S interactions in electrophilic selenenylating reagents as well as in related diselenide and methylselenide have been studied by means of quantum chemical techniques using five combinations of density functionals and basis sets. The strength of this interaction is strongly dependent on the nature of the group bound to selenium, decreasing in the order ArSeCl (**1**) > ArSeBr (**2**) > ArSeI (**3**), and is very small, if present, in diselenide ArSeSeMe (**4**) and selenide ArSeMe (**5**). NBO analysis suggests that this interaction has a covalent character and derives from a donation of the electron density from the lone pairs of sulfur ( $n_S$ ) to the antibonding orbital of the Se-X bond ( $\sigma_{Se-X}^*$ ). AIM analysis, and in particular the negative values of total energy density  $H_{Se-S}$  found for compounds **1-3** at all the level of theories further support these findings.

### 4. نتیجه گیری

ماهیت و قدرت برهمکنشهای Se...S در واکنشگرهای سلنیل دار کننده الکتروفیلی، بخوبی در ترکیب دی سلنید و متیل سلنید با تکنیکهای شیمی کوانتمی با ترکیبی از 5 روش تابعیت چگالی و مجموعه های پایه مطالعه شده اند. قدرت این برهمکنشها به شدت وابسته به ماهیت گروهی است که به سلنیم استخلاف شده است و به ترتیب بصورت (1) ArSeCl > ArSeBr > ArSeI (3) کاهش می یابند و این برهمکنشها اگر در ترکیبات دی سلنید 4 ArSeSeMe(4) و سلنید 5 ArSeMe(5) وجود داشته باشند، بسیار کوچک و ناچیز هستند. آنالیز NBO نشان میدهد که این برهمکنش خصلت کووالانسی دارد و از انتقال دانسیته الکترونی از جفت الکترونها تنهای اتم گوگرد  $n$  به اریتال ضدپیوندی پیوند  $X - Se - \sigma_{Se,-x}^*$  ناشی میشود. آنالیز AIM و بویژه مقادیر منفی دانسیته انرژی کل  $H_{Se-S}$  مشاهده شده در ترکیبات 1 تا 3 در همه سطوح نظری، این نتایج را مورد تایید قرار میدهند.



توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت Word (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، [اینجا](#) کلیک نمایید.