



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

مطالعات نظری بر روی برهمکنشهای غیر پیوندی ضعیف : $C = S \dots CH_2$
کمپلکسهای پیوند کالکوژنی با کاربن یکتایی بعنوان دهنده الکترون

عنوان انگلیسی مقاله :

Theoretical Investigations on the Weak Nonbonded $C=S \dots CH_2$
Interactions: Chalcogen-Bonded Complexes With Singlet
Carbene as an Electron Donor



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. Conclusion

In this article, we explored the noncovalent bonding interactions between $O=C=S$, $S=C=S$, $F_2C=S$, $Cl_2C=S$, and singlet carbene. Six chalcogen-bonded complexes were obtained. It is found that all the vibrational frequencies of $C=S$ bond

presented a red shift character. We carried out AIM and NBO analyses for these complexes. All these results show that there exists a weak nonbonded interaction between the chalcogen bond donor and CH_2 . An energy decomposition analysis was performed to disclose that the electrostatic interaction is the main stabilized factor in these nonbonded complexes.

4. نتیجه گیری

در این مقاله ما برهمکنشهای پیوندی غیر کووالانسی را بین مولکولهای $O=C=S$, $S=C=S$, $F_2C=S$, $Cl_2C=S$ و مولکول CH_2 یکتایی بررسی کردیم. شش کمپلکس کالکوژنی از این برهمکنشها بدست آمده اند. این نتیجه نیز بدست آمد که فرکانسهای ارتعاشی پیوند $C=S$ به سمت نواحی قرمز (فرکانسهای پایین) شیفت پیدا می کنند. ما آنالیزهای AIM و NBO را برای این کمپلکسها انجام دادیم. همه این نتایج نشان دادند که برهمکنش غیرپیوندی ضعیفی بین گروه دهنده پیوند کالکوژنی و CH_2 وجود دارد. نوعی آنالیز تفکیک انرژی نیز برای نشان دادن اینکه برهمکنش الکتروستاتیک عامل پایدار کننده اصلی این کمپلکسهاست، انجام شده است.



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.