



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

ترمودینامیک آماری برهمکنش های آروماتیک-آروماتیک در محلول آبی

عنوان انگلیسی مقاله :

Statistical thermodynamics of aromatic–aromatic
interactions in aqueous solution



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

We have analyzed the potential of mean force (PMF) between two toluene molecules in water using the three-dimensional interaction site model (3D-RISM) theory.^{14,15,23} The contribution from hydration to the PMF is calculated and decomposed into energetic and entropic components. The energetic component is further decomposed into van der Waals (vdW) and electrostatic terms. These decompositions, which cannot readily be made by a molecular dynamics simulation, have revealed the physical origins of differences between the interactions in vacuum and in water.

In vacuum, the London dispersion (*i.e.*, vdW) attractive interaction strongly induces a contact of toluene molecules. It is much stronger for the face-to-face (FF) stacking than for the T-shaped (TS) contact. However, the electrostatic interaction is repulsive for the former, whereas it is attractive for the latter. As a consequence, the FF stacking and the TS contact share almost the same stability.

۴. نتیجه گیری

ما متوسط نیروی پتانسیل (PMF) بین دو مولکول تولوئن در آب را با استفاده از تئوری (3D-RISM) مدل سه بعدی سایت برهمکنش (D-RISM3) آنالیز کردیم. سهم هیدراسیون در PMF محاسبه می شود و به اجزای داری انرژی از نظر انرژی تفکیک می شود. جزء داری انرژی بیشتر به عبارات واندروالس (VDW) و الکترواستاتیک تجزیه می شود. آنالیزهایی که می تواند به آسانی توسط یک شبیه سازی دینامیک مولکولی انجام شود، منشا فیزیکی آن اختلافات بین برهمکنش ها در خلاء و در آب آشکار شده است.

در خلاء، پراکندگی لاندن (به عنوان مثال، vdW) برهمکنش جاذبه به شدت باعث القا یک تماس مولکولهای تولوئن می شود. انباشتگی وجه به وجه (FF) از تماس T شکل (TS) بسیار قوی تر است. با این حال، برهمکنش الکترواستاتیک برای قبلی دافعه است، در حالی که برای بعدی جاذبه است. در نتیجه، انباشتگی FF و تماس TS تقریباً همان پایداری را به اشتراک می گذارد. از سوی دیگر در آب، انباشتگی FF بطور قابل توجهی با ثبات تر از تماس TS 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.