



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

دیمرها و تریمرهای فرمامیدین و مشتقات تک هالوژنه آنها



مطالعه ای مقایسه ای از پیوندهای هالوژنی رزونانس پذیر

عنوان انگلیسی مقاله :

Dimers and trimers of formamidine and its mono-halogenated analogues $\text{HN}=\text{CHNHX}$, (X = H, Cl, Br, or I): A comparative study of resonance-assisted hydrogen and halogen bonds



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

3.6. Summary and future work

The results of the computational study on the intermolecular N—X...N interaction occurring in dimer and trimer clusters of formamidine (X = H), and its mono-halogenated analogues (X = Cl, Br, or I) show that the hydrogen bond interaction is consistently stronger than the halogen bond interaction when the halogen is either Cl or Br. Trimerization strengthens the halogen bond interactions but weakens the hydrogen bond interaction. Despite these opposite effects, the hydrogen bond remains stronger than the halogen bond, when the halogen is Cl or Br. With regard to X = I, it is found that the N—I...N interaction is of comparable strength to the N—H...N interaction for the dimer clusters. Upon trimerization, however, the N—I...N interaction becomes much stronger than the N—H...N interaction. In fact, the iodine bond interaction in the trimer becomes so strong that it results in the iodine atom being symmetrically positioned between the two nitrogen atoms: N...I...N. Such a drastic geometrical change appears to be facilitated by the iodine being much larger and polarizable than the other X atoms. Certainly the size of the iodine atom gives it a better capacity to support the extent of positive charge developed upon separation from the nitrogen to which it is covalently bound. Likewise, the rest of the molecule needs to take care of the negative charge developed upon iodine separation. Here, the N=C—N fragment is instrumental in stabilizing the partial negative charge by delocalization through the π -conjugated system.

3.6. خلاصه مطلب و موضوع کار بعدی ما

نتایج مطالعات محاسباتی بر روی برهمکنش بین مولکولی N...N که در خوشه های دیمری و تریمری فرمامیدین انجام میشوند زمانیکه پیوند هیدروژنی (X=H) و یا مشتقات تک هالوژنه فرمامیدین (X=Cl, Br, I) باشد، نشان میدهند که وقتی در برهمکنش هالوژنی X=Cl, Br, I است، برهمکنش پیوند هیدروژنی از برهمکنش پیوند هالوژنی قویتر است. تریمریزاسیون، برهمکنشهای هالوژنی را تقویت اما برهمکنشهای هیدروژنی را تضعیف مینماید اما با اینحال حتی زمانیکه X=Cl, Br باشد پیوند هیدروژنی همچنان از پیوند هالوژنی قویتر است. زمانیکه X=I برهمکنش N...I...N از نظر قدرت با برهمکنش N-H...N در خوشه های دیمری رقابت میکند. با تریمریزاسیون، برهمکنش N-I...N از برهمکنش N-H...N بسیار قویتر میشود. در واقع برهمکنش پیوند ید در تریمر چنان تقویت میشود که در ساختار تریمر، اتم ید بین دو اتم نیتروژن بصورت N...I...N قرار میگیرد. چنین تغییرساختاری شدیدی به این دلیل است که اتم ید هم بزرگتر و هم قطبش پذیرتر از دیگر اتمهای X میباشد. یقیناً اندازه اتم ید سبب میشود این اتم بهتر بتواند بار مثبتی را که در نتیجه جدا شدن از اتم نیتروژن بدست آورده تحمل کند. به همین صورت بقیه مولکول نیز باید از تأثیر بار منفی ایجادشده در هنگام جدا شدن اتم ید، که سبب ناپایداری سیستم میگردد، مصون بماند. در اینجا جزء N=C-N میتواند بار منفی جزئی را از طریق رزونانس یا عدم استقرار الکترونیهای π مزدوج پایدار کند.



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.