ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

معیار جدیدی برای بررسی قدرت پیوند هیدروژنی – مطالعات روشهای آغازین و نظریه اتمها در مولکولها

عنوان انگلیسی مقاله :

A new measure of hydrogen bonding strength – ab initio and atoms in molecules studies

ایران عرضه
مرجع مقالات ترجمه شده

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.

ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

2. Computational details

Calculations were carried out with the GAUSSIAN 98 program [12] at MP2/6-311++G** level of theory. For all complexes and monomers the geometry was fully optimised. H-bond energies were computed as the difference in energy between the complex, on the one hand, and the sum of isolated monomers, on the other hand. Basis set superposition error (BSSE) was corrected by the counterpoise method of Boys and Bernardi [13]. All calculations were performed at MP2/6-311++G** level of theory. The hydrogen bonding properties predicted on the basis of the Bader theory [11] were obtained from AIMPAC programs [14].

2.جزئیات محاسبه

همه محاسبات دراین مقاله با برنامه Gaussian 98 و در سطح تئوری MP2/6-311++G** انجام میشوند. ساختار هندسی همه کمپلکسها و منومرهای سازنده آنها بطور کامل بهینه سازی میشوند. انرژیهای پیوند هیدروژنی بصورت محاسبه اختلاف انرژی بین انرژی کمپلکس ازیکسو و مجموع انرژی منومرها از سوی دیگر بدست می آیند. خطای برهم نهی مجموعه پایه BSSE ، با روش تصحیح متقابل "بویز" و "برناردی"تصحیح میگردد. همه محاسبات نیز در سطح تئوری MP2/6-311++G** انجام میشوند. پیش بینی خواص پیوندهای هیدروژنی براساس نظریه "بیدر" ، با استفاده از مجموعه برنامه های نرم افزاری AIMPAC بررسی میشوند.

ایران عرضه
مرجع مقالات ترجمه شده

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.