ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

مطالعه تابعیت چگالی برهمکنش جاذبه

لایه بسته در سیستمهای $X(ML)3^{+}$ (X=O,S,Se , M=Au,Ag,Cu)

عنوان انگلیسی مقاله :

Density functional study of closed-shell attraction

on X(ML)3 + (X=O, S, Se; M=Au, Ag, Cu) systems

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

Conclusion

In the present work, a series of central–atom gold complexes $X(MPH_3)_3^+$ (X=O, S, Se; M=Au, Ag, Cu) have been studied by means of several density functional methods. The key conclusions may be summarized as follows.

The Xα DFT methods used for the work reproduce the structural parameters of a few systems which were prepared experimentally fairly well (see Table 6). While MP2 method can not be appropriate to such closed-shell system (see also as Ref. [18]). When the metal is the same, the $R_{X–M}$ increases following the increase of the central atomic number. For the same central atom, relativistic bond length contraction effect causes that the $R_{X–Au}$ is shorter than $R_{X–Ag}$. $R_{Au–P}$ is shorter than $R_{Ag–P}$ because of the relativistic effect for the same central atom system. The metallophilic interactions to the systems have be required. For the $X(MPH_3)_3^+$ (M=Au, Ag, Cu) system, when the central atom is S or Se, the aurophilic interaction is the strongest, and the cuprophilic interaction is the weakest. For the $O(MPH_3)_3^+$ system, there is almost no metallophilic interactions. Finally, the nature of metallophilic interaction is analyzed. For the structure from D_{3h} to C_{3v}, the decrease of the pauli repulsion converts into the aurophilic and argentophilic interaction.

نتیجه گیری

در این مقاله یکسری کمپلکسهایی بصورت اتم کالکوژن مرکزی- اتم طلا، بصورت $X(MPH3)3^+$ (X=O,S,Se , M=Au,Ag,Cu) ، با چندین روش تابعیت چگالی مطالعه شده اند. نتایج کلیدی و مهم این مقاله بصورت زیر مطرح میشوند:

روشهای Xα DFT استفاده شده در این مقاله، پارامترهای ساختاری تعدادی از سیستمهایی را که بصورت تجربی تهیه شده اند، را بازتولید و شناسایی می کنند(جدول 6 را ببینید). در حالیکه روش MP2 برای چنین سیستمهای لایه بسته ای مناسب نیست و کاربردی ندارد (رفرنس 18 را ملاحظه کنید). زمانیکه اتم فلز در کمپلکس مورد مطالعه ثابت در نظر گرفته میشود، R_{X-M} (طول پیوند فلز – کالکوژن) با افزایش عدد اتمی اتم کالکوژن مرکزی افزایش می یابد. وقتی اتم کالکوژن مرکزی ثابت می ماند، اثر تراکم طول پیوند نسبیتی سبب میشود که R_{X-Au} (طول پیوند طلا – کالکوژن) از R_{X-Ag} (طول پیوند نقره – کالکوژن) کوتاهتر شود. R_{Au-p} (طول پیوند طلا- لیگاند فسفین)نیز از R_{Ag-p} (طول پیوند نقره - لیگاند فسفین) بدلیل اثر نسبیتی که برروی سیستمهایی با اتم کالکوژن مرکزی یکسان اعمال میشود، کوتاهتر است. وجود برهمکنشهای فلز دوستی در این سیستمها الزامی وضروری است. در سیستم $X(MPH3)3^+$ (M=Au,Ag,Cu) زمانیکه اتم کالکوژن مرکزی گوگرد یا سلنیم باشد، برهمکنش طلادوستی قویترین برهمکنش و برهمکنش مس دوستی ضعیفترین برهمکنش میباشد. در سیستم $O(MPH3)3^+$ تقریباً هیچ برهمکنش فلزدوستی وجود ندارد . سرانجام ، نکته آخر اینکه در این مقاله ماهیت برهمکنش های فلزدوستی بررسی میگردد . و با تغییر ساختار تقارنی D_{3h} به C_{3V} ، کاهش دافعه پائولی منجر به برهمکنش طلادوستی و برهمکنش نقره دوستی میگردد.

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.