ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

درک حلقه زایی قطبی]3+2[مکان گزین و شیمی گزین کربونیل ایلید پادوا با کاتیونن های آلفا-متیلین: مطالعه ای بر اساس نظریه تابعی چگالی.(DFT)

عنوان انگلیسی مقاله :

Understanding the regio- and chemoselective polar [3+2] cycloaddition of the Padwa carbonyl ylides with α-methylene ketones. A DFT study

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

4. Conclusions

The stereo-, regio-, and chemoselective 32CA of the Padwa CY 6 with αMK **15** to yield the oxa-bridged spirocycloadduct **16** have been studied using DFT methods at the B3LYP/6-31G(d) computa-tional level. This 32CA presents a one-step mechanism with a polar character. Six reactive channels associated to the stereo-, regio-, and chemoselective approach modes of the CY **6** to the C═C and C═O reactive sites of the αMK **15** have been analyzed. The more favorable *endo* and *exo* stereoisomeric reactive channels, which have *two-stage* mechanisms, are associated with the nucleophilic attack of the C3 atom of the CY **6** to the β-conjugated position of αMK **15**. DFT calculations, performed both in gas phase and in DCM, yield energies and free energies for the transition state structures in clear agreement with experimental regio- and chemoselectivity.

4. نتایج

با استفاده از روش‌های DFT در سطح محاسباتی B3LYP/6-31G(d) فضا گزینی، مکان گزینی و شیمی گزینی واکنش 32CA CY 6 پادوا با αMK 15 برای تولید حلقه‌ی اسپیروی 16 متصل به اکسیژن مورد مطالعه قرار گرفت. این 32CA یک مکانیزم تک گامی با یک ویژگی قطبی را ارائه می‌دهد. شش کانال واکنش‌پذیر مرتبط به حالت‌های فضا گزینی، مکان گزینی و شیمی گزینی CY 6 نسبت به بخش‌های واکنش‌پذیر C=C و C=O در αMK 15 مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. مطلوب‌ترین کانال‌های واکنش‌پذیر ایزومتری فضایی درونی و بیرونی (که دارای یک مکانیزم دو مرحله‌ای است) با حمله‌ی هسته دوستی اتم کربن C3 در CY 6 به موقعیت توأم با بتای αMK 15 در ارتباط است. محاسبات DFT در فاز گاز و DCM انجام شد و انرژی‌های تولید و انرژی‌های آزاد برای ساختارهای حالت گذار در تطابق کامل با مکان گزینی و شیمی گزینی آزمایشگاهی قرار دارد.

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.