



## بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

پیگیری مکانیسم مولکولی دکربونیلایون کتون های سیکلیک غیراشباع با  
استفاه از تئوری تکامل پیوند و آنالیز NCI

عنوان انگلیسی مقاله :

Following the Molecular Mechanism of Decarbonylation of  
Unsaturated Cyclic Ketones Using Bonding Evolution Theory  
Coupled with NCI Analysis



### 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. SUMMARY AND CONCLUDING REMARKS

In this contribution, bonding evolution theory (BET) coupled with noncovalent interaction (NCI) analysis have been used to disentangle the bond breaking/forming processes and electron redistribution along the reaction path associated with the cheletropic decarbonylation of unsaturated cyclic ketones cyclohepta-3,5-dien-1-one **CHD**, cyclopent-3-en-1-one **CPE**, and bicyclo[2.2.1]hept-2-en-7-one **BCH**. All calculations have been carried out in the framework of density functional theory using hybrid functional MPWB1K in conjugation with the aug-cc-pVTZ basis set. Cheletropic extrusion of CO from **CHD**, **CPE**, and **BCH** can be classified as nonpolar cyclo-elimination reactions with the theoretical activation energies (at 0 K) of 228.3, 236.3, and 160.7 kJ mol<sup>-1</sup>, respectively. Decarbonylation of **CHD**, **CPE**, and **BCH** take place, respectively, along 11, 8, and 8 topologically differentiated successive structural stability domains and can be represented by the sequence of turning points as **CHD**, 1-11-C[CC]C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>FFF<sup>TS</sup>C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>-0:HT + CO; **CPE**, 1-8-CC[C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>F<sup>†</sup>][FF][FF]F<sup>TS</sup>[C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>]-0:BD + CO; and **BCH**, 1-8-CC[C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>]F[FF]F<sup>TS</sup>[C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>]-0:CD + CO.

## 4. خلاصه و نتیجه گیری

در این مطالعه، تئوری تکامل پیوند (BET) در کنار آنالیز واکنش غیرکوژرفیتی (NCI) به منظور بررسی بیشتر پروسه شکست/شکل گیری پیوند و توزیع مجدد الکترون در مسیر واکنش مربوط به دکربونیلایون چله تروپی کتون های سیکلیک غیراشباع سیکلوهپتا-3و5-دی ان-1 یک **CHD**، سیکلوپنت-3-ان-1 یک **CPE** و بیسیکلو[2.2.1] هپت-2-ان-7 یک **BCH** مورد استفاده قرار گرفت. تمام محاسبات در چهارچوب تئوری تابع چگالی با استفاده از تابع MPWB1K توام با مجموعه اساس augcc pVTZ انجام شد. روزن رانی چله تروپی CO از **CHD**، **CPE** و **BCH** را می توان به صورت واکنش های حلقه زدایی غیرقطبی با انرژی فعالسازی نظری (در 0 K) به ترتیب 228.3، 236.3 و 160.7 kJ mol<sup>-1</sup> دسته بندی کرد. دکربونیلایون **CHD**، **CPE** و **BCH** به ترتیب ر موقعیت توپولوژیکی 11، 8 و 8 با محدوده های ثابت ساختاری پی در پی رخ می دهد و آن را با توالی نقاط چرخشی به صورت زیر می توان نشان داد: **CHD**, 1-11-C[CC]C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>FFF<sup>TS</sup>C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>-0:HT + CO; **CPE**, 1-8-CC[C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>F<sup>†</sup>][FF][FF]F<sup>TS</sup>[C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>]-0:BD + CO; و **BCH**, 1-8-CC[C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>]F[FF]F<sup>TS</sup>[C<sup>†</sup>C<sup>†</sup>]-0:CD + CO.

## 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.

