ایران عرضه
فروشگاه کالاهای دانلودی

بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

رفتارهای ساختاری ۱,۷ دی اکسا – اسپیرو (۵,۵) اندسان و ساختاهای مشابه دیتیا و دیسلنا در ارتباط با تاثیر آنومری : بررسی هیبرید DFT و تحلیل تفاسیرNBO و روشab initio

عنوان انگلیسی مقاله :

Conformational behaviors of 1,7-dioxa-spiro[5,5]undecane and its dithia and diselena analogs in relation to the anomeric effect: A hybrid-DFT, ab initio MO study and NBO interpretation

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. Conclusion

The above reported hybrid-DFT calculations and NBO analysis provided a reasonable picture from structural, energetic, bonding and stereoelectronic points of view for the conformational behavior in compounds **1–3**. Effectively, B3LYP/6-311+G** results revealed that the calculated ΔG_{C-B}, ΔG_{B-A} and ΔG_{C-A} values decrease from compound **1** to compound **3**. Similar trend is observed for the calculated AE_{C-B}, AE_{B-A} and AE_{C-A} values. Accordingly, the correlation between the *AE* and the calculated ΔG_{C-B}, ΔG_{B-A} and ΔG_{C-A} values is strong enough. Consequently, the rationalization of the conformational preference solely in terms of the *AE* succeeds to account for conformation A preference of compounds **1–3**.

Importantly, the variations of the calculated $\Delta\mu_{C-B}$, $\Delta\mu_{B-A}$ and $\Delta\mu_{C-A}$ values from compound **1** to compound **3** are not in the same trend observed for the corresponding ΔG_{C-B}, ΔG_{B-A} and ΔG_{C-A} values. Therefore, a reasonably correlation between the dipole moment differences and total energy differences was not found.

The contracted C_6–M_7 bond lengths in conformation B compared to that in conformations A and C can be explained by the large $LP_{ax}M_7 \rightarrow \sigma^*_{C6-M1}$ electron delocalizations (*exo-AE*) in conformations B by increasing π bond character of the C_6–M_7 bonds. Importantly, the calculated $\Delta[r_{6\text{-}M7} - r_{M1\text{-}6}]$ parameter could be proposed as a criterion for the evaluation of the *exo-AE* values in conformations B of compounds **1–3**.

۴. نتیجه گیری

محاسبات هیبرید ΔFT که در بالا گزارش شده اند ، همراه با تجزیه و تحلیل NBO ، تصویری منطقی از چشم اندازهای ساختاری ، انرژی ، پیوندی و استروالکتریکی در ترکیبات ۱-۳ ارائه می کنند. نتایج مربوط به B3LYP/6-311+G نشان می دهند که مقادیر ΔG_{C-B} و ΔG_{C-A} , ΔG_{B-A} محاسبه شده از ترکیب ۱ تا ترکیب ۳ کاهش می یابند. روند مشابهی برای مقادیر محاسبه شده AE_{C-A} , AE_{B-A}, AE_{C-B}مشاهده می شود. متعاقبا ، همبستگی بین AE ومقادیر ΔG_{B-A}, ΔG_{C-B}وΔG_{C-A} محاسبه شده از نظر AE تا جایی پیش می رود که اولویت تشکیل ساختار A برای ترکیبات در نظر گرفته شود (۳-۱). نکته مهم این است که اختلاف برای Δl_{B-A}, Δl_{C-B} محاسبه شده و Δl_{C-A} از ترکیب ۱ تا ترکیب ۳ برای ساختارهای ΔG_{B-A}, ΔG_{C-B}وΔG_{C-A} هم مشاهده می شود. بنابراین ، همبستگی منطقی بین اختلاف زمان دو قطبی و اختلاف نهایی انرژی یافت نمی شود.

طول پیوند C6–M7 در ساختارهای B در مقایسه با A,C با توجه به جابه جای هایی الکترون (exo-AE) در ترکیبات B با افزایش طول پیوند p در پیوندهای $LPM1 \rightarrow \sigma^*M1$ افزایش می یابد.

مهم تر این که ، پارامتر $\Delta[r_{6\text{-}M7}\ r_{M1\text{-}6}]$ محاسبه شده باید به عنوان معیار ارزیابی مقادیر exo-AE ساختار B در ترکیبات ۳-۱ در نظر گرفته شود.

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.