



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

مطالعه DFT (نظریه تابعی چگالی) واکنش های درون مولکولی و میان مولکولی ان-آرین (هیدروکربن های با زنجیره باز و آرین ها)

عنوان انگلیسی مقاله :

A DFT Study of Inter- and Intramolecular Aryne Ene Reactions



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

Conclusions

The molecular mechanism of the inter- and intra-AE re-actions has been theoretically studied by DFT methods at the MPWB1K/6-311G(d,p) level. These AE reactions occur through a one-step mechanism with nearly synchronous TSs in which the C–C single bond formation is slightly more advanced than the hydrogen transfer process. In all of the reactions, the arynes are very reactive. Thus, the activation energies of these AE reactions are less than 1 kcal/mol, and the reactions are strongly exothermic by more than 73 kcal/mol. Acetonitrile solvent slightly accelerates the inter-AE reactions, whereas THF slightly decelerates the intra-AE ones. For the geometry optimisations, the solvent increases the C–C distances at the TSs, and they occur earlier.

نتایج

سازوکار مولکولی واکنش های درون و میان مولکولی آرين-ان به صورت نظری از طریق روش های DFT در سطح MPWB1K/6-311G(d,p) مطالعه شد. این واکنش های آرين-ان از طریق سازگار تک مرحله ای با حالات گذار تقریباً همگامی رخ می دهند که در آنها تشکیل پیوند یگانه C-C، کمی زودتر از فرایند انتقال هیدروژن انجام می شود. در تمام واکنش ها، آرين ها بسیار واکنش پذیر هستند. بنابراین، انرژی های فعالسازی این واکنش های آرين-ان کمتر از 1 kcal/mol است، و واکنش ها به میزان انرژی آزاد شده بیش از 73 kcal/mol به شدت گرما زا هستند. حلال استونیتریل تا حد کمی واکنش های درون مولکولی آرينان را تسریع می کند، در حالیکه تری فلوئوراستالدهید سرعت واکنش های میان مولکولی آرين-ان را تا حدی کاهش می دهد. در مورد بیهنه سازی های هندسی، حلال فاصله های C-C را در حالات گذار افزایش می دهد، و این افزایش فاصله ها زودتر انجام می شوند.



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.