



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

n- منشأ مواد شیمیایی مورد انتخاب در واکنش های کراس بنزوین کاتالیز شده کاربن هتروسیکلیک

عنوان انگلیسی مقاله :

Origin of Chemoselectivity in N⁻ Heterocyclic Carbene Catalyzed Cross-Benzoin Reactions: DFT and Experimental Insights



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

■ CONCLUSION

The origin of chemoselectivity in the triazolium-catalyzed crossbenzoin reaction has been explored. With the piperidinone-derived triazolium (I) catalyst, the chemoselectivity is determined kinetically. This is supported by computational and ^1H NMR studies, as well as a series of crossover experiments. The common pyrrolidinone-derived catalyst (I') was found to display a strikingly similar energy profile for this reaction, despite experimental data showing that it is less chemoselective. Chemoselectivity could not be improved through kinetic control with this catalyst; however, equilibrating conditions show substantial preference for the same cross-benzoin product kinetically favored by the piperidinone-derived catalyst.

نتیجه گیری

ریشه شیمی گزینی در واکنش بنزوئین چلیبایی با تریازولیوم کاتالیز شده کاشو شده است. با کاتالیزور تریازولیوم مشتق شده از پپیریدینون، شیمی گزینی از نظر جنبش شناسی مشخص شده است. این مورد توسط مطالعات محاسباتی و HNMR، و همچنین یک سری آزمایشات متقاطع مورد پشتیبانی قرار گرفته است. کاتالیزور مشتق شده از پایرولیدینون معمول نمایه انرژی کاملاً مشابهی برای این واکنش نشان داد، و این علیرغم داده های آزمایشی بود که نشان می دادند این کمتر به انتخاب شیمیایی مربوط است. شیمی گزینی را نمی توان از طریق کنترل جنبشی با این کاتالیزور بهبود داد؛ اما، شرایط متوازن نشان دهنده برتری اساسی برای همان فرآورده بنزوئین متقاطع بود که از نظر جنبشی (نیروی محرک) توسط کاتالیزور مشتق شده از پپیریدینون مطلوب شده بود



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.