

تجزیه و تحلیل ساختار واثر آنومری به وسیله مایکروویو اسپکتروسکوپی و سکویی و روش های آغازین

غلامرضا مرادی

کارشناسی ارشد رشته شیمی فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی اراک

نام نویسنده مسئول:

غلامرضا مرادی

چکیده

در این تحقیق تجزیه و تحلیل ساختار واثر آنومری به وسیله مایکروویو اسپکتروسکوپی و سکویی و روش های آغازین مورد بررسی قرار گرفته است. مثال های فراوان در شیمی کربوهیدرات ها نشان می دهد که قند های پیرانوزی با گروه های الکترون کشنده مثل هالوژن یا آلکوسی در C-1 معمولاً در حالتی پایدارترند که استخلاف در موقعیت محدودی باشد. این تمایل تنها به کربوهیدرات ها محدود نمی شود بلکه روی سیستم های حلقوی ساده تر مثل ترا هیدرو پیران های ۲- استخلافی نیز مشاهده می شود. این پدیده به عنوان اثر آنومری شناخته می شود زیرا شامل استخلاف در موقعیت آنومری در حلقه های پیرانوزی کربوهیدرات ها می شود. بزرگی اثر آنومری به ماهیت استخلاف بستگی دارد و با افزایش ثابت های دی الکترونیک حلال از شدت آن کاسته می شود. چند عامل ساختاری به عنوان علل محتمل بر اثر آنومری در نظر گرفته شده است در حیطه پیوند ظرفیتی می توان تشخیص داد که میان پیوند های قطبی در کربن آنومری در صورت بندی استوایی یک دافعه دوقطبی - دو قطبی وجود دارد. این دافعه دو قطبی - دو قطبی در صورت بندی محوری کاهش می یابد و این عامل احتمالاً در وابستگی اثر آنومری به حلال سهم دارد. از دیدگاه اوربیتال مولکولی، اثر آنومری به عنوان نتیجه ای از برهمکنش میان الکترون های جفت تنها روی اکسیژن پیرامون اوربیتال σ^* مربوط به پیوند با استخلاف اکترونگاتیو C-2 توصیف می شود. هر دو نتایج محاسبه ای و تجربی پیشنهاد دهنده این است که Meo-oz یک معادله هندسی را ترجیح می دهد، حالت را به چرخش به شکل گیری گروه Meo حساس می باشد. اختلاف در مرکز آنومریک وجود دارد که از اثر اسکو - آنومر یک که در آلکین پیرانوساید و اکثراً در آلکین پیرانوساید چرخه ای مشاهده می شود.

واژگان کلیدی: ساختار، اثر آنومری، مایکروویو اسپکتروسکوپی و سکویی، روش های آغازین.

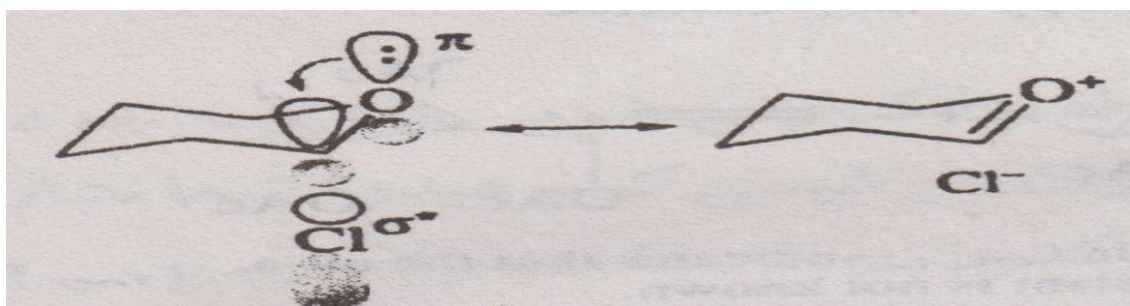
مقدمه

شکل های مختلفی که یک مولکول می تواند به خود بگیرد، صورت بندی های آن مولکول نامیده می شود. انرژی کل یک مولکول با شکل آن رابطه ای مستقیم دارد. این انرژی از چند مؤلفه تشکیل می شود که آنها را تا حدی می توان به ویژگی های ساختاری مشخص نسبت داد. از جمله عواملی که در انرژی کل سهم دارند و ارتباط درکی با ساختار مولکولی دارند، می توان به برهمکنش های غیر پیوندی، کشش حلقه در سیستم های حلقوی، کشش های پیچشی ناشی از پوشیدگی پیوند ها، ناپدید شدن به دلیل انحراف طول پیوندی یا زاویه پیوندی از مقادیر بهینه اشاره کرد. برعکس، عوامل پایدار کننده ای هم وجود دارند که دارای قیدهای هندسی هستند. اکثر این عوامل را می توان در زمره اثرهای فضا الکترونی به شمار آورد، یعنی برای بیشینه شدن برهمکنش های پایدار کننده به یک رابطه هندسی خاص نیاز است. به علاوه، برهمکنش های دیگری نیز وجود دارد مثل تشکیل پیوند هیدروژنی یا برهمکنش های دو قطبی - دو قطبی که برای آنها قدرت برهمکنش به شدت به شکل هندسی مولکول بستگی دارد. اصولی که تحلیل تعادل های صورتبندی در آنها استوار است؛ در چارچوبی بسط یافته اند که خود یا به در مکانیک کوانتوم دارد. یک مولکول، کم انرژی ترین شکلی را به خود می گیرد که از چرخش حول پیوندهای ساده خود و دیگر نسبتاً به طور جزئی تغییر می کند، شکل مولکولی در وهله نخست به وسیله فرایند های چرخشی آن تعیین می شود. سیستمی برای تحلیل اختلاف انرژی میان مولکول ها و میان صورت بندی های گوناگون آنها وجود دارد که مفاهیم بنیادی آن را و ستمایر فرمولبندی کرده است این روش اکنون به عنوان مکانیک مولکولی شناخته می شود. صورتبندی هیدروکربن های غیر حلقوی را با بسط دادن اصول مطرح شده در تحلیل تعادل های چرخشی بوتان و اتان می توان تفسیر کرده صورتبندی هیدروکربن های نپوشیده متناظر با انرژی صورت پتانسیل کمینه و صورت بندی های پوشیده متناظر با انرژی پتانسیل بیشینه اند. از میان صورت بندی های نپوشیده شکل های آنتی از شکل های گویچ پایدارترند. وجود هسته و اتم ها در حلقه می تواند باعث اثر فضا الکترونی شود که به نوبه خود اثرات محسوسی بر صورت بندی و در نهایت واکنش پذیری دارند. مثال های فراوان در شیمی کربوهیدرات ها نشان می دهد که قند های پیرانوزی با گروه های الکترون کشنده مثل هالوژن یا آلکوسی در C-1 معمولاً در حالتی پایدارترند که استخلاف در موقعیت محدودی باشد. این تمایل تنها به کربوهیدرات ها محدود نمی شود بلکه روی سیستم های حلقوی ساده تر مثل ترا هیدرو پیران های ۲- استخلافی نیز مشاهده می شود. این پدیده به عنوان اثر آنومری شناخته می شود زیرا شامل استخلاف در موقعیت آنومری در حلقه های پیرانوزی کربوهیدرات ها می شود. بزرگی اثر آنومری به ماهیت استخلاف بستگی دارد و با افزایش ثابت های دی الکترونیک حلال از شدت آن کاسته می شود.

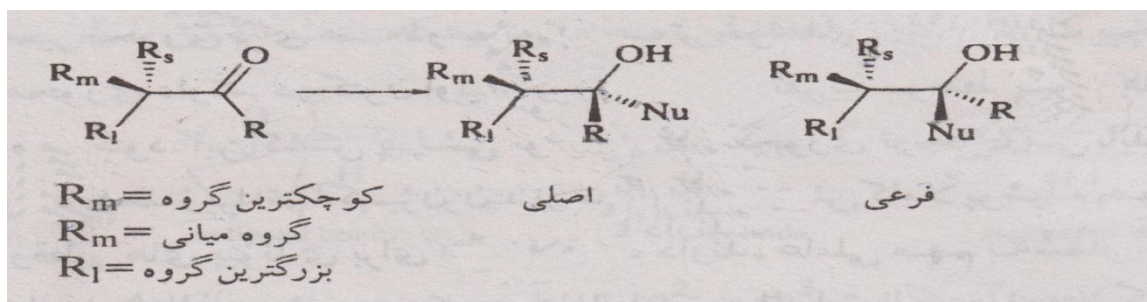
چند عامل ساختاری به عنوان علل محتمل بر اثر آنومری در نظر گرفته شده است در حیطه پیوند ظرفیتی می توان تشخیص داد که میان پیوند های قطبی در کربن آنومری در صورت بندی استوایی یک دافعه دو قطبی - دو قطبی وجود دارد. این دافعه دو قطبی - دو قطبی در صورت بندی محوری کاهش می یابد و این عامل احتمالاً در وابستگی اثر آنومری به حلال سهم دارد.

از دیدگاه اوربیتال مولکولی، اثر آنومری به عنوان نتیجه ای از برهمکنش میان الکترون های جفت تنها روی اکسیژن پیرامون اوربیتال

σ^* مربوط به پیوند با استخلاف اکترون گاتیو C-2 توصیف می شود. هنگامی که پیوند C-X محدودی باشد، برهمکنش میان یک اوربیتال اشغال نشده نوع P روی اکسیژن (الکترون های جفت تنها) و اوربیتال ضد پیوندی σ^* از پیوند C-X امکان پذیر می شود. به این ترتیب، نامستقر شدن الکترون های جفت تنها میسر می شود و انتظار می رود پیوند C-O تقویت شود در حالی که طول پیوند C-X افزوده و از قدرت آن کاسته می شود.

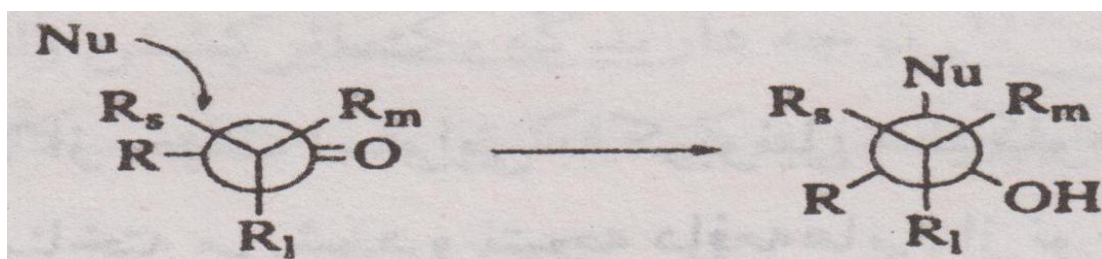


چند سال قبل، یک رابطه تجربی مشخص می گردد که اکنون به عنوان قاعده کرام شناخته می شود. هنگامی که R^1 و R^2 و R^3 از نظر اندازه با هم تفاوت داشته باشند و جهت گیری مولکول به نحوی باشد که بزرگترین گروه نسبت به اکسیژن کربونیل به حالت آنتی باشد، محصول اصلی از افزایش بین هسته دولت به استخلاف کوچکتر تشکیل خواهد شد.



عوامل ساختاری:

در تفسیر این نتیجه عوامل ساختاری گوناگون مدنظر قرار گرفته اند: عمومی ترین روش رضایت بخشی بر یک مدل حالت گذار مبتنی است که توسط فلکین و همکاران بسط داده شده است و در آن جهت گیری بزرگترین گروه عمود در گروه کربونیل است



محاسبات STO-3G معلوم کرده است که حالت گذار مربوط به این واکنش به میزان چند کیلو کالری بر مول در صورت بندی های ممکن دیگر پایدار تر است. علت از جمعیت این صورتبندی حالت گذار، پایدار شدن LUMO پایدار تر باشد، برهمکنش با HOMO ی هسته دوستی که نزدیک می شود قوی تر می شود. در آن صورت، فضا گزینی مشاهده شده (قاعده کرام) ترکیبی از اثرات فضا الکترونی که استخلاف عمودی را ارجح می سازند و اثر فضایی است که نزدیک شدن از جهتی را ارجح می سازد که کوچکترین استخلاف آن را اشغال کرده است.

تجزیه و تحلیل ساختار و اثر آنومری به وسیله مایکروویو اسپکتروسکوپی و سکویی و روش های آغازین

در هشتم ژولای سال ۱۹۸۷ همکاری و کمک برای بخشی از شیمی؛ از دانشگاه میشیگان، دانشگاه کلن و جمهوری فدرال آلمان صورت گرفت. پانزده گونه ایزوتروپی از متوکی اتیلن سنتز شده و مایکروویو از آن تولید شد.

ممان دو قطبی در حد ۱۰۹۹ به عنوان ساختاری از ثابتهای چرخشی به وسیله مربعات (r0) و جانشینی (rs) تعیین شد. ایزوتوپ متوکسی اتیلن دارای یک حلقه در قسمت محوری متوکسی جانشین پیوند C-OCH₃ می باشد. گروههای متوکسی به صورتی که عکس حلقه هیدروژن جای آن در بالای حلقه ایزوتوپ بگیرد نمایش داده می شوند محاسبات abinitio نتایجی برای آماده کردن اطلاعات اضافی از ساختارهای پایه می باشد. هردوی نتایج آنومر یک واگرو آنومریک نظری و تجربی هستند. اثر آنومری یک پدیده استروالکترونیک است که اطلاعاتی از مولکول و واکنش های از حلقه را در اختیار می گذارد.

اثر استروالکترونیک یک اثر از اثر واگرو آنومریک می باشد. اثرات آنومریک واگرو مریک به صورت یکسان ارتباط الکترونیکی با برهنکنش ۲ تا الکترون بین اربیتالهای غیر پیوندی و اربیتالهای پیوندی می باشد. تعداد زیادی از کریستالوگرافیتهای X-Ray تقسیم می شوند به کربوهیدراتها که در طول زیاد از اگزوسیکلیک پیوندهای C-X وقتی که X هالوژن است و در طول کوتاه پیوندهای C-X از اگزوسیکلیک وقتی که X یک اکسیژن باشد. جفری و پاپل از تکنیک های اربیتالی مولکولی آغازین ab به منظور تحقیق در کربوهیدرات به منظور ارتباط بین ساختارهای نظری و تجربی استفاده کردند.

روش های تئوری

بهترین حالت شکل هندسی از Meo-OZ توسط ((هارتی - فوک)) با استفاده از اوریبتالهای اسلیتری HF-4-31G و STO-3G سطوحی از تئوری برای حل کردن و توسعه برنامه های جدید برای محاسبه انرژی آنالیتیک برای کشیدن حلقه هاست. و این تعریفی از کشیدن

حلقه کوئردینانس توسط پاپل می باشد. برای چنین اهدافی اوربیتالهای مولکولی کل الکترونیهای توزیع یا پخش (R) وزمینة لاپلاس $\nabla^2 P(r)$ با استفاده از برنامه های COLOCNEC تجزیه ای می دهد که شامل قسمتهای مهم از گوسین ۸۲ می باشد و اوزون خالص در دمای (۴۱°C-) بوجود می آید و در دمای (۱۹۶°C-) ننگه داشته می شود.

اوزون های بدست آمده دارای ۸۰٪ حالت سین و ۲۰٪ حالت ترانس می باشد پس برای حالت (E) استرین = ۸۰٪ برای حالت (Z) استرین = ۲۰٪ می باشد. پارانیتر و استوفنون ۳ به وسیله تغییرات از حالت های ویژه طبیعی با استفاده از اسید استیک ۱ در دمای ۱۳۰°C برای مدت ۲۴ ساعت به وجود می آید.

روش تهیه Meo-oz-3,5,5,q₃

بوجود می آید از تجزیه اوزون در پارانیتر و α-اتواکسی استرین ۲ در Dcooch_3 هیچ انتقال درونی برای گروه های متیل جذب ندارند. وظیفه ایزوتوپهای ویژه همچنین شامل شاخه Q در تغییر گریز از مرکز مناسب می باشد. چون MeO-OZ هیچ نوع عنصری از تقارن را ندارند. $3N=39$ اتمی معادل با 3N-6 داخلی است که برای تعریف ساختار مورد نیاز هستند در اصل این تناسب را می توان با استفاده از یک میدان مربع کم از ممان مشاهده اینرسی (روش r^0) محاسبه نمود یا با استفاده از معدله کریچمن آن را محاسبه نمود. چندین فرضیه بنیادین برای استفاده روشهای قابل مشاهده یا میدان مربع قابل در نظر گرفته شده اند. این فرضها شامل C-H و متیل C-H با فاصله 1.090 هستند. همچنین مشاهده شد که جداسازی لحظه ای اینرسی از نمونه های OCD3 انحراف rms بین پارامترهای مشاهده شد و محاسبه شد که از ۱۱۲٪ به ۰.۴۹٪ گسترش می آید. فهرست کاملی از انتقالهای تعیین شده و سانتیفره های جدا شده برای تمامی نمونه ایزوتروپ در دسترس است؛ بررسی از ثابتهای جدا شده برای ۱۴ نمونه آنها را با علائمی شبیه ومدار مغناطیسی مشابه نسبت به نمونه ایزوتروپ نشان می دهد.

ممان دو قطبی

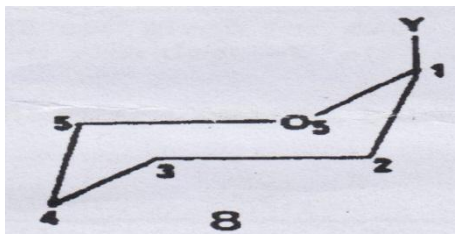
اثر ثانویه استارک برای اجزاء $l_m=1$ از انتقال اندازه گیری شدند. اندازه های بطوری دی در ۲ به ۴ ارزش میدان الکتریکی تعیین شدند. کمترین میدان مربع با استفاده از ضرایب ثانویه استارک در اجزاء دو قطبی محاسبه می شوند. بین پیوستگی r^0 و توافق معقول موجود است به جزء پیوستگی از C_{10} و O_6 و پیوستگی H_9 و O_2 این چهار مورد از ۰.۱ تا ۰.۳، انگستروم طبقه بندی می شوند که از روش کراچ من نتیجه گیری شده و پیوستگی کوچکی از این اتمهاست. در تعیین پیوستگی های کوچک (وسعت ارتعاش واکنشای چرخش) را بدون تجزیه ارتعاش تعیین کرد. داده های ایزوتوپی برای تعیین ساختار با روش کراچ من در دسترس هستند زیرا $C_{10}, H_{11}, H_{12}, H_{13}$ دارد. جایگزین منفی در دسترس نیستند. برای بدست آوردن ساختار r^0 برای C_3 پیوستگی دارد و از پیوستگی r^0 استفاده می شود. ما معتقدیم میزان متوسط این پارامترها با اطمینانی که بر هر دوی محاسبات احاطه دارد بهترین روش است که meo-oz را گزارش کند اگر چه ارتباط فیزیکی ساختار توجیهی ندارد، پارامترها عدم اطمینان زیادی دارند که اکثر به ساختار معادله احاطه دارند. شکل گیری بدیع موقعیت گروه متیل بر روی حلقه است. این اولین رخداد واضح حاصل از ساختارها برای چنین شکلی در یک جانشینی OR در یک حلقه شش ضلعی است. بطور نمونه در کربوهیدراتها یک گروه متیل در جانشینی الوکسی روی انیدو سایکلیک اکسیژن قرار گرفته در حالیکه به سمت انیدو سایکلیک کربن انتقال می یابد و آنرا در بیرون حلقه قرار می دهد تا هیدروژن متیل را به حداقل برساند این شواهد بر اساس جمع آوری ممان دو قطبی داده NMR در شبیه ساز ترکیب پنج عضوی ۲- متوکسی -۱ و ۳- دی اگزالان موجودند. معدله گوچ در محلول شکل دهنده ۶ دارای ۲ نظم o-c-o- است که تصور می شود از o-c-ome محکم تر باشد. از آنجائیکه شکل دهنده گوچ ۷ دارای فقط یکی است. لذا شالوده اثر آنومریک اکسو می باشد. اگر چه محل گروه متیل me-o-oz مثبت شده است هیچ موج کوتاه برای تعیین چرخش داخلی زاویه برای این گروه وجود ندارد. تعیین مستقلی از معادله هندسی meo-oz با کمک محاسبات صورت گرفته است. محاسبات نشان می دهد که متیل هیدروژنها بطور کامل با توجه به پیوند C_1-O_6 می باشند و این شکل در خلال چرخش گروه متوکسی با در خلال حلقه فرعی باقی می ماند. فاصله غیر ساختاری C_1, H_{13} برابر $2/66A^0$ است؛ پس از فرض تعیین مشاهدات تجربی هندسی پشتیبانی می کند.

روش کریمر

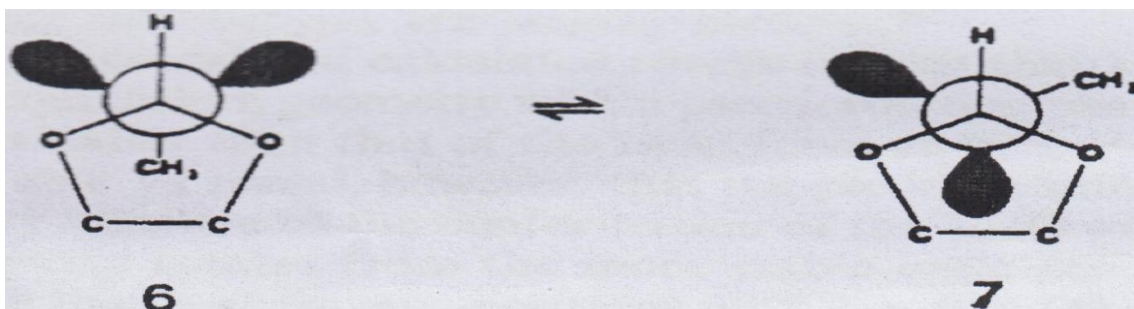
کریمر نشان داده است که جایگزینهای π مانند meo موقعیت محوری را ترجیح می دهند؛ در این موقعیت فراوان شدن بین Homo و Oz که از مشخصه π پردازش می کند و الکترونیهای غیر پیوندی از یک جانشینی (x=meo) به حداقل رسیده است.

نتایج محاسبات تجربی

هر دو نتایج محاسبه ای و تجربی پیشنهاد دهنده این است که Meo-oz یک معادله هندسی را ترجیح می دهد، حالت را به چرخش به شکل گیری گروه Meo حساس می باشد. اختلاف در مرکز آنو مر یک وجود دارد که از اثر اسکو - آنومر یک که در آلکین پیرانوساید و اکثراً در آلکین پیرانوساید چرخه ای مشاهده می شود. در کل شکل های پیرانوز ۸ با فرمول کلی $CH_2X CH_2Y$ می باشند که x اکسیژن بوده و به اسکو چرخه ای C₁-Y کوتاه شده است. مقایسه انرژی ها، هندسه ها و توزیع شارژ برای ۱ و ۲ و ۳ فراهم کننده امکاناتی است که در آن چرخه هندسی از پیامد های اثرات آنومریک و اسکو آنومریک هستند.



مسیر جفت الکترون ها و تغییر محل آنها به خاطر واکنشهای آنومریک در یک O-C-X است و این بستگی به σ^* (C-X) دارد. احاطه بین جفت ها (e) و اوربیتال های σ^* و $E=x$ انرژی (C-X) کمتر از σ^* (C-O) است. در مورد Meo-oz پیشبینی مسیر الکترون تغییر مکان شده سخت است اگر چه تجزیه ای از Mos محاسبه شده نشان می دهد که Lumo از Meo-oz حلقه ای است. جفت الکترونیهای غیر پیوندی بین op اتمهای تنظیم شده در Meo-oz که در ارتباط دائم یا π ضعیف تر هستند.



در ساختاری از آلفا کلرو نیتروز و اتریک؛ برای بدست آوردن هیدروکسی مولکتون (۲) و بوتیل نوع سوم هیپوکلریت (۱/۸۹) به وسیله ای تجزیه x-Ray کریستالوگرافیت بوجود آمد. با اضافه کردن گروه های آلفا - آلوکسی؛ فعال کردن یا ارتباط ۲ تا از تعداد یا بیشتر از یکی از آلفا کلرونیتروز و آلکان ها صورت می گیرد. فعال کردن اطلاعاتی از ۱ برای تجزیه x-Ray از انتخاب دیاسترومر از افزایش حلقه می باشد. افزایش حلقه از آکریال ترکیبات کلرونیتروز و قادر به تولید محصولاتی از علوم طبیعی می باشد. علاقه ی ویژه ی ما به سنتزهای اینوزوماین و استرپتوماین است. متأسفانه الکل در ترکیبات نیتروز و به واکنش هایی با درجه حرارت پائین نیاز دارد و سپس به واکنش های با درجه حرارت بالا؛ سپس افزایش حلقه را محدود می کند. کلرونیتروزو اتر از هیدروکسی مولکتون براحتی بدست می آوریم، کلرونیتروزواتر در مقابل افزایش حلقه ثابت می باشد که کاملاً پایدار بوده و به مقدار زیادی واکنش نشان می دهد.

با استفاده از روش های ذیل حالت چند انتخابی افزایش حلقه یا تثبیت آنانتیومر خالص دی هیدروکسین تعیین می شود:

کشیدگی دی هیدرواکزاین باکام فر (+) ۱۰ سولفونیل لکراید و اضافه کردن پیکههایی به صورت انفرادی دیاستروایزومرهایی از طیف H-NMR است.

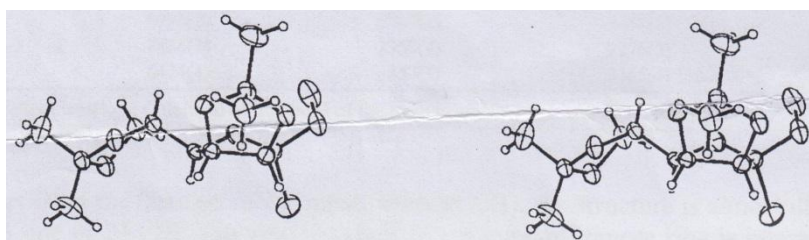
Compound	Optically active compound	Recemic compound	Ee[%]	Yield (%)
۱۷	۲/۸۴ و ۳/۵۴	۳/۵۴ و ۲/۸۴ ۳/۴۴ و ۲/۹۹	≥۹۶	۸۸
۱۸	۳/۶۲ و ۳/۰۱	۳/۶۲ و ۳/۰۱ ۳/۵۹ و ۳/۰۸	≥۹۶	۹۶
۱۹	۳/۸۶ و ۳/۰۳	۳/۸۶ و ۳/۰۳ ۳/۶۵ و ۳/۱۷	≥۹۶	۹۵

قلیائی کردن دی هیدرواکساین خام با (S) - ۳ و ۳ و ۳ - تری فلوئورو - ۲- متواکسی - ۲- فنیل - پرو پیونیل کلراید می باشد
جداسازی دیاستروایزومرهای از استرها با استفاده از CC و تشدید پیک های انفرادی آن (در جدول ۳) ص ۱۱۳۹

جدول ۳

Compound	Optically active compound R(I)	Recemic compound R(II)	Ee[%]
۲۰	۱۹۵۴	۱۹۱۹ ۱۹۵۴	≥۹۸
۲۱	۲۱۲۶	۲۱۲۶ ۲۱۳۴	≥۹۸
۲۲	۱۷۳۲	۱۷۲۵ ۱۷۳۲	≥۹۸
۲۳	۱۹۸۹	۱۹۸۹ ۲۰۰۹	≥۹۸

هرکدام از این روش ها برای تعیین چند انتخابی کفایت می کند. اگرچه مورد a و b نیازمند به محصول شیمیائی کمی دارد یا یک تقویت کننده ممکن از یک دیاستروایزومر در واکنش مشتق گیری می باشد.
برای اثبات فقدان تقویت سازی در خلال شکل گیری این مشتق ها ماراسمیک دی هیدرواکسین را بکار برده ایم. که از ترکیبات دی ان وراسمیک کلرو نیتروزو بدست آمده است.

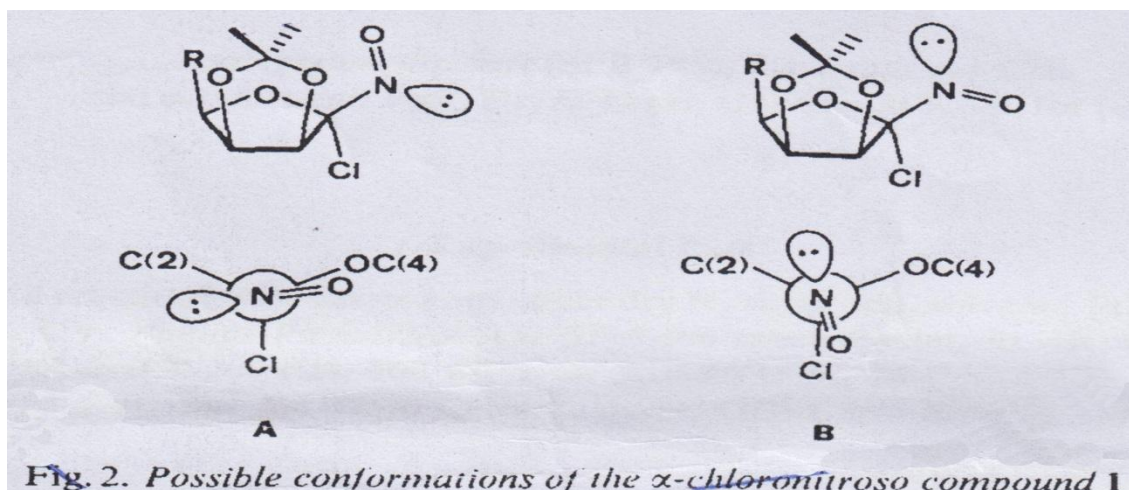


ساختار ۱ توسط اشعه x بدست آمده که پراکندگی تجزیه را نشان می دهد. تصویر ۱ ارائه مجدد کشیدگی اتم های H با شعاع های دلخواه به سمت پائین می آیند، دیگر اتم ها با حالت های حرارتی به احتمال ۵۰ درصد به هم نزدیک می شوند پس از انتقال های شاخص میلر با و این تصفیه با هماهنگی سیستم ۲۴ ادامه یافت اگرچه ممکن بود که همه را قرارداد اما سه اتم H در یک غلظت مختلف الکترونی پس از طیف آنیزوتروپیک تصفیه سازی N-C-Cl1 و اتم های O صورت گرفت. پس بنابراین هماهنگی اتم های H متعلق به گروه های CH₃ و CH₂ محاسبه شده اند و در تصفیه های بیشتر مجاز می شوند روی اتم های C که بدان تعلق دارند بنشینند.

کلیه محاسبات برنامه ها SNEL XTL استفاده گردیده

اتم O با گروه NO یک حالت بدیع نسبت به حلقه اتم O تبدیل شده است (5) 4.3- = O(1) - N(1) - C(1) - O(4) از شکل ۱ در ترانس های ۱ و ۴ دی کلرو ۴ - ۱ دی نیتروزوسیكلوهگزان (۲۴) با اتم O یک حالت بدیع از اتم CL ارائه می دهد. این حالت بدیع به جمعیت الکترون های آزاد N اجازه واکنش می دهد. اوربیتال از پیوند قطبی (C-CL یا C-O) است یا ممکن است بنابراین نوعی از اگزو به عنوان نوعی از اثر آنومریک باشد. سپس درسیس ۳ و ۲ دی کلرودی اگزان طول پیوند 1/781 Å است برای حالت استوائی و برای حالت محوری طول پیوند برای C-CL برابر 1/819 Å می باشد.

پیوند زاویه ای اندوسیلیک در C(2)(O14)-C(1)-C(2)=108.9° در مجاورت اثر آنومری کیپ می شوند. همانطور که از دلایل استریک انتظار می رود؛ زوایای پیوندی بزرگتر است در C(1) نسبت به زاویه O(4)-C(1)-N(1)=113.4° حالت چسبندگی ساختار ۱ واکنش بالای آن و انتاب پذیری در افزایش حلقه می باشد. همچنین ممکن است در پایین ترین شکل انرژی رخ دهد. بالاترین انتخاب پذیری افزایش حلقه در مقابل حضور عمده ای از شکل گیری بعدی B است



که در آن گروه NO نسبت به پیوند C-CL و جفت الکترون آزاد N یا جفت الکترون غیرپیوندی N ممکن است بر همکنش های با اربیتال از پیوند C-CL و اربیتال از گروه NO با اربیتال از پیوند C-O باشد همه ی واکنش های استفاده شده تحت تأثیر نیتروژن خشک بوجود می آید.

[α]D: پریکین المر - پلاریومتر؛ سلهای یک دسی متر. UV: فیلیپس - PYE.
IR: پریکین - المر ۲۵۷ یا ۱۵۷ اسپکترومتر. NMR: بروکر - 200MH2-WP

روش کنتز و زینر

کتروزینر تولید می کنند از اتیل کلرواستیمات هیدروکلریدن در (ET2O): 100ML و اضافه شدن در 0°C. از 41.42gr و 0.3 میلی مول) و در آب (100mli) در مدت ۳۰ دقیقه باهم مخلوط می شدند و لایه ی آبکی از Et₂O بدست می آید. سپس مخلوط در دمای 25°C بوجود می آید. بعد لایه ی آبکی به وسیله ی KHCO₃ خنثی می شود و CH₂CL₂ از آن استخراج می شود و MgSO₄ خشک از فیلتر استخراج می شود و بعد تبخیر می شود و به صورت خام در می آید تقطیر خالص در نقطه ی جوش 48° و فشار ۱۴ تور بوجود می آید.

منابع و مراجع

- [1] R U Lemieux S Koto D Voisin in anomeric effect, origin and consequences, Eds. W. A. Szarek and D. Horton. ACS Symp. Ser . 1979, 87, 17.
- [2] J. Mullay, J. Am. Chem. Soc. 1985,107, 7271.
- [3] J. A. Jeffrey, J. H. Yates, J. Am. Chem. Soc. 1919, 101, 820.
- [4] International Tables for X-ray Crystallography, Kynoch Press, Birmingham, England, 1974, Vol. IV.
- [5] J D Dunitz in X-ray analysis and the structure of organic molecules, Cornell University Press. Ithaca, New York, 1979, p. 312-318.
- [6] R E Kaiser, Tabellen zur Gaschromatographie, in analytiker Taschenbuch, Eds. H. Kienitz, R. Bock, W. Fresenius, W. Huber, and G. Tolg. Springer Verlag, Berlin Heidelberg-New York, 1980. Vol. 1, pp. 175.
- [7] A. Wehrli, E. Kovats, Helv. Chim. Acta 1959, 42, 2109