على النحو الذي تحدده البلورات بالأشعة السينية ، ومشتقات حمض ميلدروم زوايا ثنائي السطح حول ميزة ٨-١٩ المركزي سندات جيم جيم = مزدوجة بين ٣ و ٨٣ درجة. روابط هيدروجينية بين RHN بدائل والمجموعات شبه الكربونيل صالح بلاناريتي. بدائل Sterically تطالب صالح زوايا ثنائي السطح الكبيرة والهياكل zwitterionic كما هو الحال في صيغة ٢٠ AM1 .حسابات الهياكل هي في الاتفاق ممتازة مع البيانات التجريبية للأشعة السينية ، بشرط إدراج حقل عازلة .(ε = 40) ويمكن إرجاع ذلك إلى الطبيعة للغاية (zwitterionic) قطبية الجزيئات. ومن المتوقع كذلك أن جميع هذه الجزيئات ، بما في ذلك تلك التي استقرت في شكل مستو بواسطة روابط هيدروجينية ضمجزيئي عامل ضمن الجزيئ ، والخضوع التناوب السريع حول الوسطى السندات جيم جيم = في درجة حرارة الغرفة. حسابات تجهيز الدوائر إدراج حقل نموذج عازلة (بي سي إم) في اتفاق ممتازة مع الترتيب شبه عمودي من ألكين شاردة في ١٩ الاستماع قراءة صوتية للكلمات القاموس - عرض القاموس المفصل .

As determined by X-ray crystallography, Meldrum's acid derivatives 8-19 feature dihedral angles around the central C=C double bonds between 3 and 83°. Hydrogen bonds between substituents RHN and the carbonyl groups favour near-planarity. Sterically demanding substituents favour large dihedral angles and zwitterionic structures as in formula 20. AM1 calculations of the structures are in excellent agreement with the experimental X-ray data, provided a dielectric

field is incorporated (ε = 40). This can be ascribed to the highly polar (zwitterionic) nature of the molecules. It is further predicted that all these molecules, including those that are stabilised in a planar form by intramolecular hydrogen bonds, undergo rapid rotation about the central C=C bonds at room temperature. DFT calculations incorporating a dielectric field model (PCM) are in excellent agreement with the near-perpendicular arrangement of the alkene moiety in 19.