

硅杂苯与亲二烯体的Diels-Alder反应

王岩; 曾小兰; 汪玲

信阳师范学院化学化工学院, 河南 信阳 464000

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)在B3LYP/6-311G(d,p)水平上研究了硅杂苯与一些亲二烯体的两类可能的Diels-Alder反应的微观机理、势能剖面、取代基效应和溶剂化效应. 计算结果表明, 所研究反应均以协同的方式进行. 亲二烯体分子碳原子上的苯基取代基对两个新键形成的非同步性和反应的活化能垒的影响取决于苯基在产物中的相对位置, 而硅杂苯分子中硅原子上的CCl₃取代基有利于杂Diels-Alder反应的进行. 形成一个C—Si键的杂Diels-Alder反应在热力学和动力学上均远比相应的全碳Diels-Alder反应容易进行, 实验观察到的杂Diels-Alder反应中的区域选择性由动力学因素所控制. 硅杂苯与烯炔的反应比与相应炔烃的反应在动力学上容易进行一些, 但在热力学上后者远比前者容易进行. 苯溶剂对所研究反应的势能剖面影响较小.

关键词: 硅杂苯 亲二烯体 Diels-Alder反应 反应机理 密度泛函理论

收稿日期 2008-07-17 修回日期 2008-10-06 网络版发布日期 2008-11-12

通讯作者: 王岩 Email: wangyanxytc@163.com

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(1206KB\)](#)

服务与反馈

- [把本文推荐给朋友](#)
- [加入我的书架](#)
- [加入引用管理器](#)
- [引用本文](#)
- [Email Alert](#)
- [文章反馈](#)
- [浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

- ▶ [硅杂苯](#)
- ▶ [亲二烯体](#)
- ▶ [Diels-Alder反应](#)
- ▶ [反应机理](#)
- ▶ [密度泛函理论](#)

本文作者相关文章

- ▶ [王岩](#)
- ▶ [曾小兰](#)
- ▶ [汪玲](#)