

## C<sub>59</sub>XH(X=N, B)与1,3-丁二烯Diels-Alder环加成反应的区域选择性

梁云霄 尚贞锋 许秀芳 赵学庄

宁波大学材料科学与化学工程学院, 新型功能材料及其制备科学国家重点实验室培育基地, 浙江 宁波 315211; 南开大学化学系, 天津 300071

摘要:

应用半经验的AM1和密度泛函B3LYP/6-31G\*方法对1,3-丁二烯与C<sub>59</sub>XH(X=N, B) Diels-Alder环加成反应的区域选择性进行理论研究, 选择一些有代表性的C<sub>59</sub>XH(X=N, B)的6—6键探讨环加成反应的机理. 1,3-丁二烯与C<sub>59</sub>NH进行的Diels-Alder反应, 随着加成位置远离C<sub>59</sub>NH的N原子, 活化能越来越低, 但都比1,3-丁二烯与C<sub>60</sub>相应反应的活化能高. 与此相反, 对于1,3-丁二烯与C<sub>59</sub>BH进行的环加成反应, 加成位置最靠近B原子的2,12/r-和2,12/f-过渡态的势垒最低, 并且比1,3-丁二烯与C<sub>60</sub>进行环加成反应的活化能约低18 kJ·mol<sup>-1</sup>, 其产物也是热力学最稳定的. 与C<sub>60</sub>相应的反应相比, C<sub>59</sub>NH和C<sub>59</sub>BH中N和B原子不同的电子性质对其邻位双键进行Diels-Alder环加成反应的活性产生了不同影响, 前者使反应活性降低, 后者使反应活性增强.

关键词: C<sub>59</sub>XH(X=N, B) Diels-Alder环加成 区域选择性 AM1 DFT

收稿日期 2008-03-31 修回日期 2008-07-02 网络版发布日期 2008-09-08

通讯作者: 梁云霄 Email: liangyunxiao@nbu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1839KB\)](#)

[英文版PDF \(908KB\)](#)

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

▶ C<sub>59</sub>XH(X=N, B)

▶ Diels-Alder环加成

▶ 区域选择性

▶ AM1

▶ DFT

本文作者相关文章

▶ 梁云霄

▶ 尚贞锋

▶ 许秀芳

▶ 赵学庄