

Exploring the Relationship between Reactivity and Electronic Structure in Isorhodanine Derivatives Using Computer Simulations

Autorzy

Michał Michalski

Sławomir Berski

Rok wydania

2023

Czasopismo

Molecules

Numer woluminu

28

Strony

2360/1-2360/13

DOI

10.3390/molecules28052360

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The electronic structure and reactivity of 22 isorhodanine (IsRd) derivatives in the Diels–Alder reaction with dimethyl maleate (DMm) were investigated under two different environments (gas phase and continuous solvent $\text{CH}_3\text{COOHCH}_3\text{COOH}$), using free Gibbs activation energy, free Gibbs reaction energy, and frontier molecular orbitals to analyze their reactivity. The results revealed both inverse electronic demand (IED) and normal electronic demand (NED) characteristics in the Diels–Alder reaction and also provided insights into the aromaticity of the IsRd ring by employing HOMA values. Additionally, the electronic structure of the IsRd core was analyzed through topological examination of the electron density and electron localization function (ELF). Specifically, the study demonstrated that ELF was able to successfully capture chemical reactivity, highlighting the potential of this method to provide valuable insights into the electronic structure and reactivity of molecules.

Słowa kluczowe

Diels-Alder, isorhodanine, reactivity, ELF, AIM

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.3390/molecules28052360>

Plik został wygenerowany dnia 2026-10-10 00:19:59

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/74dtoOf>.