Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Why are rhodanines less efficient reagents in Diels–Alder reactions than isorhodanines? A quantum chemical study.

Autorzy

Waldemar Tejchman

Michał Michalski

Krzysztof K. Zborowski

Sławomir Berski

Rok wydania

2019

Czasopismo

Journal of Molecular Modeling

Numer woluminu

25

Strony

190/1-190/11

DOI

10.1007/s00894-019-4063-y

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The reactivity of the 5-arylidenerhodanine and 5-arylideneisorhodanine derivatives in reactions with dimethyl maleate was computationally studied at the DFT(M06-2X)/6–311+G(d,p) theory level. Eight stereoisomers of the reaction products were considered. The effect of the solvent was taken into account by means of the continuous and discrete models for acetic acid (PCM and three CH_3COOH molecules). Aromatic stabilization of the transition states was documented by the values of HOMA, NICS(0), and NICS(1) indices. The higher reactivity of the isorhodanine derivative was associated with a relatively low activation energy, ΔE_a (15.2–22.3 kcal mol^{-1}), which is needed to cross the TS. For the rhodanine derivative, higher values of ΔE_a (34.1–36.1 kcal mol^{-1}) were obtained. The reactivity was also studied from the perspective of the frontier molecular orbitals, the energy gaps between the HOMO and LUMO, the flux of electron density, the Fukui functions, $f^+(r)$, $f^-(r)$, and $f^0(r)$, and the global indexes defined in the conceptual DFT, i.e., the electronic chemical potential, chemical hardness, global electrophilicity, and empirical nucleophilicity index.

Słowa kluczowe

Diels-Alder, Rhodanine, isorhodanine, dimethyl maleate

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/10.1007/s00894-019-4063-y

Strona internetowa wydawcy

http://link.springer.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-13 16:33:21
Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/neJRQzI.