



شیمی و مهندسی شیمی

تهران - بهمن ۱۳۹۷

مکانیسم واکنش چند جزئی بین سیکلوهگزیل ایزوسیانیید (ترشیو بوتیل ایزوسیانیید) و دی متیل استیلن دی کربوکسیلات در حضور 2- مرکاپتو بنزوکسازول: یک مطالعه نظری

¹بتول مکی آبادی ²محمد زکریانزاد *

1- دانشگاه صنعتی سیرجان، سیرجان، ایران

2- دانشگاه پیام نور، تهران

خلاصه

در این تحقیق، مکانیسم واکنش بین سیکلوهگزیل ایزوسیانیید، دی متیل استیلن دی کربوکسیلات در حضور 2- مرکاپتوبنزوکسازول با استفاده از روش B3LYP و مجموعه پایه 6-311++g(d,p) مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به نتایج تئوری، یک مکانیسم منطقی برای واکنش پیشنهاد شد و مرحله اول واکنش به عنوان مرحله تعیین کننده سرعت شناخته شد. از دیدگاه نظری مطلوب ترین مسیر و ساختار برای محصول پیش بینی شد. به منظور ارزیابی میزان پایداری هر یک از ساختارهای سهیم در واکنش و نیز بررسی اثر ساختار و ثابت دی الکتریک حلال، تمام ساختارها در فاز گازی و در حلال دی کلرومتان بهینه شده اند.

کلمات کلیدی: مکانیسم واکنش، آلکیل ایزوسیانیدها، اثر حلال، ثابت دی الکتریک، مرحله تعیین کننده سرعت

1. مقدمه

ایزوسیانیدها دسته ای از ترکیبات آلی پایدار با گروه عاملی مهم با اتم کربن دو ظرفیتی هستند که با سیانید ها ایزومر محسوب می شوند. به طور معمول آلکیل ایزوسیانیدها در واکنش های حلقه زایی با هترو دی آن های الکتروفیل مزدوج شرکت می کنند. کربن دو ظرفیتی در ترکیبات ایزوسیانیید در اکثر واکنشها مخصوصاً واکنش های چند جزئی و واکنش های حلقه زایی شرکت می کند. این کربن دو ظرفیتی در هر دو واکنش افزایشی هسته دوستی و الکترون دوستی شرکت می کند [1-3]. توانایی ایزوسیانیدها برای ترکیب آسان با هردوی هسته دوستها (نوکلئوفیل) و الکترون دوستها (الکتروفیل) باعث شده تا به عنوان یک واکنش دهنده محبوب برای توسعه واکنش های چند جزئی جدید استفاده شود. مطالعات زیادی بر روی واکنش های چند جزئی ایزوسیانیدها انجام شده است [4]. واکنش سیکلوهگزیل ایزوسیانیید (R1) و دی متیل استیلن دی کربوکسیلات (R2) در حضور 2-NH-اسید 2-مرکاپتوبنزوکسازول (R3) منجر به تولید مشتقات مالئات می شود [5]. در این تحقیق، با محاسبات کوانتومی قصد داریم تا شواهدی مستدل برای مکانیسم صحیح واکنش ارائه دهیم. لذا برای دستیابی به اطلاعات سینتیکی مفید، این واکنش مورد بررسی نظری قرار گرفته است.

* Corresponding author: Mohammad Zakarianezhad
Email: bmakiabadi@yahoo.com&bmakiabadi@sirjantech.ac.ir