NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT PHẢN ỨNG GIỮA ETOXI VÀ n-PROPYL BROMUR

Bùi Thọ Thanh, Phùng Quán, Vương Thế Thành
Khoa Hóa, Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên - ĐHQG tp.HCM

Tóm tắt:

Nghiên cứu tính toán ab-initio phản ứng giữa etoxi và n-propyl bromur trong cả pha khí và trong dung môi etanol để tìm hiểu sự cạnh tranh giữa các khuynh hướng tạo thành sản phẩm S_N2, E2(anti), E2(syn). Năng lương dùng để so sánh tính toán điểm đơn theo phương pháp nhiễu loạn bậc hai từ hình dạng đã tối ưu theo phương pháp Hartree - Fork, MP2/6-31+G**//HF/6-31+G*. Trong pha khí có sự vượt trội của phản ứng theo khuynh hướng E2(anti) so với khuynh hướng E2(syn) điều này thể hiện qua giá trị năng lượng của mỗi dạng so với chất nền riêng rẽ lần lượt là -15.8368 kcal/mol và -4.2697 kcal/mol. Do sự ưu tiên về mặt entropy dạng E2(anti) cũng vượt trội so với dạng S_N2. Trong dung môi etanol có sự khác biệt dạng E2(anti) không còn vượt trội so với dạng S_N2 nữa mà ngược lại dạng S_N2 vượt trội so với dạng E2.

THEORETICAL STUDIES OF REACTION BETWEEN ETHOXI WITH n-PROPYLBROMUR

Bui Tho Thanh, Phung Quan, Vuong The Thanh
Department of Chemistry, University of Natural Sciences - VNU.HCM

Abstract:

High level ab-initio calculations was applied to the reaction between ethoxi with n-propyl bromur in a gas-phase system and in ethanol solution. The S_N2, E2(anti), E2(syn) reaction path were investigated and transition state was . At the MP2/6-31+G**//HF/6-31+G* level of theory activation barries were calculated. Analytical frequencies was compute for each transition state and minimum.. Base on reaction energy we found : in gas-phase E_2(anti) prefer than E_2(syn), energy of E_2 (anti) is -15.8368 kcal/mol while E2(syn) is -4.2697kcal/mol. And E2 pathway also prefer than S_N2 because of entropy prefer. Thing completely difference in ethanol solution where S_N2 pathway is dominate.