

CALCUL AB-INITIO ET DFT DES DÉRIVÉS DU BENZOFUROXANE DANS LA RÉACTION DE DIELS-ALDER

Reçu le 20/09/2004 – Accepté le 19/12/2008

Résumé

Les dérivés benzofuroxaniques constituent une famille d'hétérocycle très intéressants en chimie organique. Les composés sont dotés d'une exceptionnelle réactivité et d'un fort caractère électrophile mis en évidence par la formation de complexes sigma stables (complexes de Meisenheimer). Nous montrons dans le présent travail que l'action des diénophiles **2** sur les dérivés benzofuroxaniques **1** conduit à la possibilité de réactions de Diels-Alder à demande inverse d'électrons (DADEI). Dans le cas de l'addition du diène **3** sur les dérivés benzofuroxaniques, nous avons obtenu une Diels-Alder à demande normale d'électrons (DADNE). Nous avons également discuté d'un point de vue thermodynamique, la possibilité de l'addition d'une deuxième molécule de diène ou de diénophile sur les adduits formés. Les résultats permettent de confirmer que ces hétérocycles possèdent un caractère aromatique intrinsèque faible.

Mots clés : superélectrophile, calcul ab-initio, méthode DFT

Abstract

Benzofuroxaniques derivatives are a family of heterocyclic very interesting in organic chemistry. The compounds are endowed with exceptional responsiveness and a strong electrophilic character highlighted by the formation of stable sigma complex (Meisenheimer complexes). We show in this work that the action of the dienophile **2** derivatives benzofuroxaniques **1** leads to the possibility of Diels-Alder with inverse electron demand (DADEI). In the case of the addition of diene **3** on derivatives benzofuroxaniques, we obtained a Diels-Alder normal electron demand (DADNE). We also discussed a thermodynamic standpoint, the possibility of adding a second molecule of diene or dienophile on adducts formed. The results confirm that these heterocycles have a low intrinsic aromatic character.

Keywords: superélectrophile, ab-initio calculations, DFT method

S. AYADI
M. ABDERRABBA

Unité de recherche Physico-Chimie
Moléculaire.IPEST, Boîte postale 51,
2070 la Marsa, Tunisie

ملخص

المشتقات من عائلة المتجانسة مثيرة جدا للاهتمام في الكيمياء العضوية. Benzofuroxaniques والمركبات وهيا استجابة استثنائية وشخصية قوية للإلكترونات التي أبرزها تشكيل مجمع مستقرة سينغما Meisenheimer **2** diénophile benzofuroxaniques المجمعات). نعرض في هذا العمل أن عمل **1** يؤدي إلى إمكانية ديلس - أدر مع الطلب معكوس الإلكتر في حالة إضافة **3** ديين DADEI المشتقات **1** إلى إمكانية ديلس - أدر مع الطلب معكوس الإلكتر DADNE ، حصلنا على ديلس - أدر العادي الإلكترون الطلب benzofuroxaniques على المشتقات diénophile ناقشنا أيضا وجهة نظر الدينامية الحرارية ، في إمكانية إضافة جزيء الثانية من ديني أو تشكيلها. وهذه النتائج تؤكد أن حلقات غير متجانسة لديهم انخفاض جوهري الطابع adducts على العطرية.

الكلمات المفتاحية: superélectrophile ، أساسها حسابات من أساسه ، وطريقة تجهيز الدوائر