

ملخص

تفاعل إضافة دايأزو ألكانات إلى ألكاين-خماسي كربونيل الكروم يؤدي إلى تكوين مركبات بيرازول. و يوجد هناك طريقتين لحدوث التفاعل.

الهدف من هذه الدراسة هو تحديد أي الطريقتين أفضل من حيث استهلاك الطاقة باستخدام الحوسبة الكيميائية. بحيث تمت دراسة الأشكال وكيفية الترابط و الطاقة لكل المركبات في كلا الطريقتين في حالتها المستقرة و الانتقالية.

أيدت النتائج مرور التفاعل عن طريق إضافة الدايازو ألكان إلى ألكاين المرتبط مع خماسي كربونيل الكروم متبوعا بإعادة ترتيب الروابط، و ذلك لأن هذا الطريق يحتاج طاقة تنشيط أقل للوصول إلى النواتج. كما أوضحت النتائج كيفية الترابط في كل مركب من هذه المركبات.

من الممكن استنتاج أن مركبات كربونيل الكروم تلعب دورا مهما كعامل مساعد لإتمام التفاعل بسرعة عن طريق تقليل طاقة التنشيط اللازمة للتفاعل.