微波促进的化学反应

1. 反应方程式



N-(2-呋喃亚甲基)-1,1-二苯甲胺 N-(二苯基亚甲基)-1-(2-呋喃基)甲胺

1. 实验操作：把反应物和溶剂加入反应瓶中，然后在640W(640瓦，功率)微波功率下反应90分钟，发生双键转移，各种溶剂对反应收率的影响如下表所示：

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 成对输入 | 成对输出 | 收率（%） | 备注 |
| 1 | （乙酸乙酯） | （）  （乙酸乙酯） | 5% |  |
| 2 | （四氢呋喃） | （四氢呋喃） | 4% |  |
| 3 | （N,N-二甲基甲酰胺） | （N,N-二甲基甲酰胺） | 5% |  |
| 4 | （丙酮） | （丙酮） | 5% |  |
| 5 | （噻吩） | （噻吩） | 4% |  |
| 6 | （甲苯） | （甲苯） | 4% |  |
| 7 | （二氧六环） | （二氧六环） | 2% |  |
| 8 | CH3OH  （甲醇） | CH3OH  （甲醇） | 5% |  |
| 9 | （氯苯） | （氯苯） | 6% |  |
| 10 | （仲丁醇） | （仲丁醇） | 2% |  |
| 11 | （甲苯）    （二苯甲酮） | （甲苯）    （二苯甲酮） | 4% | 由于二苯甲酮是固体，原料N-(2-呋喃亚甲基)-1,1-二苯甲胺也是固体，因此须加溶剂甲苯进行均相反应。 |
| 12 | （苯胺） | （苯胺） | 7% |  |
| 13 | （糠醛） | （糠醛） | 98% |  |
| 14 | （氯化苄） | （氯化苄） | 96% |  |
| 15 | （环己酮） | （环己酮） | 95% |  |
| 16 | （2-噻吩甲醛） | （2-噻吩甲醛） | 95% |  |
| 17 | （苯甲酸） | （苯甲酸） | 92% |  |
| 18 | （二甲基亚砜） | （二甲基亚砜） | 40% |  |
| 19 | （苄醇） | （苄醇） | 30% |  |
| 20 | （苯甲醛） | （苯甲醛） | 98% |  |
|  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 溶剂名称 | 乙酸乙酯 | 四氢呋喃 | N,N-二甲基甲酰胺 | 丙酮 | 甲苯 | 噻吩 | 甲醇 | 二氧六环 | 氯苯 |
| 双键转移后的产物收率 | 5% | 4% | 5% | 6% | 4% | 4% | 1% | 2% | 6% |
| 备注 |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

续表

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 仲丁醇 | 甲苯+二苯甲酮 | 苯胺 | 糠醛 | 苄氯 | 环己酮 | 2-噻吩甲醛 | 苯甲酸 | 二甲基亚砜 | 苄醇 |
| 2% | 4% | 7% | 98% | 96% | 95% | 95% | 92% | 40% | 30% |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

|  |  |
| --- | --- |
| 苯甲醛 |  |
| 98% |  |
|  |  |

3、通过机器学习，确定什么样的分子能促进这个反应进行或预测出最好的溶剂是什么。