



异腈化合物插入到配合物 $\text{CpW}(\text{NO})(n\text{-C}_5\text{H}_{11})(\eta^3\text{-CH}_2\text{CHCHMe})$ 金属-碳键的反应机理
Reaction Mechanisms of Isocyanide Insertion into the W-alkyl Linkage of $\text{CpW}(\text{NO})(n\text{-C}_5\text{H}_{11})(\eta^3\text{-CH}_2\text{CHCHMe})$ Complex

摘要点击: 83 全文下载: 32

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

中文关键词: [密度泛函](#) [反应机理](#) [迁移插入](#) [异腈](#) [异构化](#)

英文关键词: [density functional theory](#) [reaction mechanism](#) [migratory insertion](#) [isocyanide](#) [isomerization](#)

基金项目:

作者	单位
刘凌君	曲阜师范大学化学与化工学院, 曲阜 273165
毕思玮	曲阜师范大学化学与化工学院, 曲阜 273165
袁相爱	曲阜师范大学化学与化工学院, 曲阜 273165
凌宝萍	曲阜师范大学化学与化工学院, 曲阜 273165
孙海涛	曲阜师范大学化学与化工学院, 曲阜 273165
李平	曲阜师范大学化学与化工学院, 曲阜 273165

中文摘要:

本文利用密度泛函理论研究了异腈化合物中CN基团插入到 $\text{CpW}(\text{NO})(\text{C}_5\text{H}_{11})(\eta^3\text{-CH}_2\text{CHCHMe})$ (A)中W-C键中的反应机制。研究发现, 异腈插入到W-C键过程实际上是一个烷基迁移过程; 相对于烯丙基, 正戊基迁移到异腈碳原子上在热力学、动力学上更有利。提出了插入产物(B)与其环状异构体(C)之间的平衡转化机理, 同时发现C为Fischer型金属卡宾配合物, 金属中心具有 d_6 电子构型。

英文摘要:

With the aid of density functional theory calculations, the mechanistic study on the insertion of CN of methylisocyanide into the M-C bond of $\text{CpW}(\text{NO})(\text{C}_5\text{H}_{11})(\eta^3\text{-CH}_2\text{CHCHMe})$ (A) has been performed. It is found that the methylisocyanide insertion into metal-alkyl linkage is in fact a process of the alkyl ($-\text{C}_5\text{H}_{11}$) migration into methylisocyanide. In comparison with the allyl group, the alkyl ($-\text{C}_5\text{H}_{11}$) migration into methylisocyanide is more favorable both kinetically and thermodynamically. The mechanism for the reversible transformation between the insertion product B and its cyclic isomer C has been proposed. C is found to be a Fischer carbene complex with the metal center having a d_6 configuration.

您是第1114823位访问者

主办单位: 中国化学会 单位地址: 南京大学化学楼

服务热线: (025)83592307 传真: (025)83592307 邮编: 210093 Email: wjhx@netra.nju.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计