

研究论文

PdCl<sub>2</sub>催化炔酸烯丙酯环化反应的密度泛函研究

张宝辉 李明

(西南大学化学化工学院 重庆 400715)

收稿日期 2008-8-8 修回日期 2008-11-17 网络版发布日期 2009-6-28 接受日期 2009-1-8

摘要

用密度泛函方法(DFT)研究了PdCl<sub>2</sub>催化炔酸烯丙酯环化反应的机理. 在B3LYP/6-311G\*\*水平上优化了各反应中间体和过渡态的结构. 计算结果表明, 反应是放热的, 主要经历了炔键的卤钯化、烯炔对烯基钯的迁移插入以及 $\beta$ -杂原子消除等过程. 烯炔的迁移插入是反应的手性决定步骤,  $\beta$ -杂原子消除是反应的速率控制步骤. 理论预测的主要产物是与实验吻合的(Z,R)- $\alpha$ -亚烷基- $\gamma$ -丁内酯.

关键词 [炔酸烯丙酯环化](#)  [\$\beta\$ -杂原子消除](#) [密度泛函方法](#) [反应机理](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

李明 [liming@swnu.edu.cn](mailto:liming@swnu.edu.cn)

作者个人主页:

张宝辉 李明

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(712KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“炔酸烯丙酯环化”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [张宝辉,李明](#)