

Periselectivity in Electrocyclic Processes: [2+2] vs. [4+2] Selectivity in the Cycloaddition Reaction between Ketenes and α, β - Unsaturated Imines

Lecea, Begoña;
Euskal Herriko Unibertsitatea
Farmazia Fakultatea
450 Posta Kutxa
01080 Gasteiz

Arrieta, Ana; Roa, Guillermo;
Cossío, Fernando P.
Euskal Herriko Unibertsitatea
Kimika Fakultatea
1072 Posta Kutxa. 20080 Donostia
E-mail: qopcomof@sq.ehu.es

BIBLID [1137-4411 (1997), 4; 91-109]

Zetenak eta 1-azadienoen arteko erreakzioa konputazionalki aztertu egiten da. Helburua, [2 + 2] edota [4 + 2] zikloaduktoen formazioa esplikatzen duen eredu orokor bat aurkitzea da. Prozesu elektroziklikoan ematen den urratsa erreakzioaren produktuak determinatzen duena denez gero, elektroziklazioan gerta daitezkeen bi trantsizio egoeratarako bideratuko dugu geure analisia. Disolbatzailearen eragina kontutan hartuko da ere, Onsager-en teoria erabiliz.

El objetivo de este trabajo es el estudio computacional del comportamiento de diversas cetenas y 1-azadienos para desarrollar un modelo general que pueda explicar las variables que determinan la formación de [2 + 2] y [4 + 2] cicloadductos. Puesto que el paso electrocíclico determina los productos de la reacción, nos concentramos en los estados de transición compatibles con el proceso electrocíclico. El efecto del disolvente se ha tomado en cuenta mediante el modelo de Onsager.

L'objectif de ce travail est l'étude computationnelle du comportement de plusieurs cétènes et 1-azadiènes pour développer un modèle général qui puisse expliquer les variables qui déterminent la formation des cycloadductes (2+2) et (4+2). Étant donné que l'étape électrocyclique détermine les produits de la réaction, on se concentre aux états de transition compatibles avec le processus électrocyclique. On a tenu en compte l'effet du solvant en utilisant le modèle d'Onsager.

Giltz-Hitzak: Prozesu elektroziklikoak. Disolbatzailearen eragina.
Palabras Clave: Procesos electrocíclicos. Efecto del disolvente.
Mots Clés: Processes électrocycliques. Effect du dissolvant.