

研究论文

S-脯氨酸催化丙酮与2,2-二甲基丙醛不对称直接羟醛缩合反应过渡态的理论研究

樊建芬*, 吴丽芬

(苏州大学化学化工学院 江苏省有机合成重点实验室 苏州 215006)

收稿日期 2004-9-14 修回日期 2004-12-28 网络版发布日期 接受日期

摘要 采用从头计算和密度泛函方法研究了S-脯氨酸催化丙酮和2,2-二甲基丙醛的不对称Aldol反应的立体控制步骤,同时考虑了DMSO溶剂效应.

计算得到了四个立体异构过渡态的优化构型及其相对能量,解释了该不对称反应的立体选择性.

关键词 [B3LYP](#) [HF](#) [不对称催化直接羟醛缩合反应](#) [S-脯氨酸](#) [丙酮](#) [2,2-二甲基丙醛](#) [溶剂效应](#)

分类号

Transition State Study on the S-Proline-catalyzed Direct Aldol Reaction between Acetone and 2,2-Dimethyl-propionaldehyde

FAN Jian-Fen*, WU Li-Fen

(Key Laboratory of Organic Synthesis of Jiangsu Province, College of Chemistry and Chemical Engineering, Suzhou University, Suzhou 215006)

Abstract HF and DFT calculations were employed to study the four stereoisomeric transition states in the stereo-controlling step of the direct aldol reaction between acetone and 2,2-dimethyl-propionaldehyde catalyzed by S-proline. The solvent effect of DMSO was involved. The calculation results revealed the enantioselectivity of the reaction.

Key words [B3LYP](#) [HF](#) [asymmetric catalytic direct aldol reaction](#) [S-proline](#) [acetone](#) [2,2-dimethyl-propionaldehyde](#) [solvent](#)

DOI:

通讯作者 樊建芬 jffan@suda.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(253KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“B3LYP”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [樊建芬](#)

· [吴丽芬](#)