

# Unraveling the Selectivity Patterns in Phosphine-Catalyzed Annulations of Azomethine Imines and Allenates

Por: [Gallardo-Fuentes, S](#) (Gallardo-Fuentes, Sebastian)<sup>[1]</sup>; [Ormazabal-Toledo, R](#) (Ormazabal-Toledo, Rodrigo)<sup>[1,4]</sup>; [Fernandez, I](#) (Fernandez, Israel)<sup>[2,3]</sup>

[Ver número de ResearcherID y ORCID de Web of Science](#)

JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY

Volumen: 85

Número: 14

Páginas: 9272-9280

DOI: 10.1021/acs.joc.0c01272

Fecha de publicación: JUL 17 2020

Tipo de documento: Article

[Ver impacto de la revista](#)

## Abstract

The mechanism and selectivity of phosphine-catalyzed [3 + 2] and [3 + 3] annulations of azomethine imines and allenates have been computationally studied. Exploration of the potential energy surface reveals that the cyclization step is a key step controlling the selectivity of the process. This contrasts with previous studies on related transformations where the initial nucleophilic addition involving the activated allenate was found to exclusively control the regioselectivity of the transformation. Among the possible reaction pathways, the energetically low-lying reaction channel involves an intramolecular Michael addition leading to the experimentally observed [3 + 2] product. The factors controlling the observed regioselectivity have been quantitatively rationalized by means of state-of-the-art computational methods, namely, the activation strain model of reactivity in combination with the energy decomposition analysis.

## Palabras clave

**KeyWords Plus:** [NONCOVALENT INTERACTIONS](#); [DENSITY FUNCTIONALS](#); [ALLENES](#); [CYCLOADDITION](#); [REACTIVITY](#); [CHEMISTRY](#); [KINETICS](#); [OLEFINS](#); [CHARGE](#)

## Información del autor

### Dirección para petición de copias:

*Universidad de Chile Univ Chile, Fac Ciencias, Dept Quim, Santiago 1058, Chile.*

*Complutense University of Madrid Univ Complutense Madrid, Dept Quim Organ 1, Fac Ciencias Quim, Madrid 28040, Spain.*

*Complutense University of Madrid Univ Complutense Madrid, Ctr Innovac Quim Avanzada ORFEO CINQA, Fac Ciencias Quim, Madrid 28040, Spain.*

**Dirección correspondiente:** Gallardo-Fuentes, S (corresponding author)

+ Univ Chile, Fac Ciencias, Dept Quim, Santiago 1058, Chile.

**Dirección correspondiente:** Fernandez, I (corresponding author)

+ Univ Complutense Madrid, Dept Quim Organ 1, Fac Ciencias Quim, Madrid 28040, Spain.

**Dirección correspondiente:** Fernandez, I (corresponding author)

+ Univ Complutense Madrid, Ctr Innovac Quim Avanzada ORFEO CINQA, Fac Ciencias Quim, Madrid 28040, Spain.

#### Direcciones:

+ [ 1 ] Univ Chile, Fac Ciencias, Dept Quim, Santiago 1058, Chile

+ [ 2 ] Univ Complutense Madrid, Dept Quim Organ 1, Fac Ciencias Quim, Madrid 28040, Spain

+ [ 3 ] Univ Complutense Madrid, Ctr Innovac Quim Avanzada ORFEO CINQA, Fac Ciencias Quim, Madrid 28040, Spain

+ [ 4 ] Univ Bernardo OHiggins, Ctr Integrat Biol & Quim Aplicada CIBQA, Santiago 8370854, Chile

**Direcciones de correo electrónico:**[sgallardo@ug.uchile.cl](mailto:sgallardo@ug.uchile.cl); [israel@quim.ucm.es](mailto:israel@quim.ucm.es)

#### Financiación

Entidad financiadora <a href="#">Mostrar más información</a>	Número de concesión
Spanish Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)	CTQ2016-78205-P CTQ2016-81797-REDC PID2019-106184GB-I00
European Union (EU)	CTQ2016-78205-P CTQ2016-81797-REDC PID2019-106184GB-I00
Comision Nacional de Investigacion Cientifica y Tecnologica (CONICYT) CONICYT FONDECYT	3170653
supercomputing infrastructure of the NLHPC	ECM-02

[Ver texto de financiación](#)

#### Editorial

AMER CHEMICAL SOC, 1155 16TH ST, NW, WASHINGTON, DC 20036 USA

#### Información de la revista

- **Impact Factor:** [Journal Citation Reports](#)

#### Categorías / Clasificación

**Áreas de investigación:**Chemistry

**Categorías de Web of Science:**Chemistry, Organic

## **Información del documento**

**Idioma:**English

**Número de acceso:** WOS:000551550500046

**ID de PubMed:** 32589024

**ISSN:** 0022-3263

**eISSN:** 1520-6904