

Angewandte Chemie

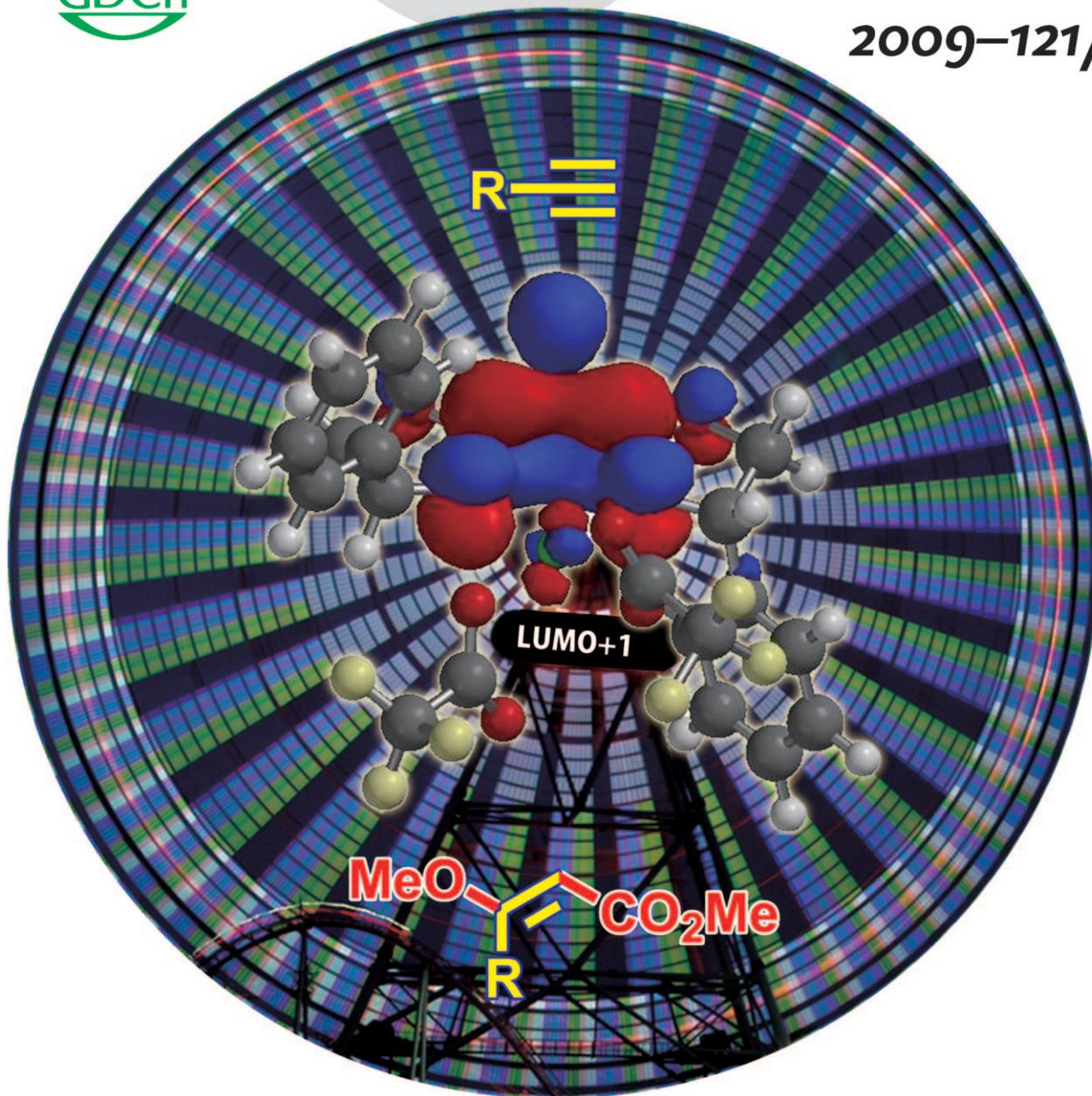
Eine Zeitschrift der Gesellschaft Deutscher Chemiker



Chemie

[www.angewandte.de](http://www angewandte de)

2009–121/18



Ein Bisoxazolin-Ligand ...

... erhöht die Präferenz von Pd^{II} für π-Systeme. Die direkte Umwandlung von terminalen Alkinen in β-Methoxyacrylate mit Komplexen solcher Bisoxazolin(box)-Liganden wird von K. Kato und Mitarbeitern in der Zuschrift auf S. 3376 ff. beschrieben. Dichtefunktionalrechnungen belegen, dass die π-Orbitale des Liganden in [Pd(box)(TFA)₂] über die Doppelbindungen und die Peripherie delokalisiert sind und energetisch nahe dem LUMO liegen. Die Reaktion kann auch in einer Synthese von Kawain genutzt werden.

Innentitelbild

**Keisuke Kato,* Satoshi Motodate, Tomoyuki Mochida,
Takuya Kobayashi und Hiroyuki Akita***

Ein Bisoxazolin-Ligand erhöht die Präferenz von Pd^{II} für π -Systeme. Die direkte Umwandlung von terminalen Alkinen in β -Methoxyacrylate mit Komplexen solcher Bisoxazolin(box)-Liganden wird von K. Kato und Mitarbeitern in der Zuschrift auf S. 3376 ff. beschrieben. Dichtefunktionalrechnungen belegen, dass die π -Orbitale des Liganden in $[\text{Pd}(\text{box})(\text{TFA})_2]$ über die Doppelbindungen und die Peripherie delokalisiert sind und energetisch nahe dem LUMO liegen. Die Reaktion kann auch in einer Synthese von Kawain genutzt werden.

