

Force-transformed free-energy surfaces and trajectory-shooting simulations reveal the mechano-stereochemistry of cyclopropane ring-opening reactions.

Autorzy

Przemysław Dopieralski

Jordi Ribas-Arino

Dominik Marx

Rok wydania

2011

Czasopismo

Angewandte Chemie -
International Edition

Numer woluminu

50

Strony

7105-7108

DOI

10.1002/anie.201100399

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The force-transformed free-energy surfaces obtained by means of sophisticated ab-initio metadynamics simulations on force-transformed potential-energy surfaces have rationalized the intriguing experimental data on the ring opening of dichlorocyclopropane (see scheme) induced by a mechanical force (F).

Adres publiczny

<https://doi.org/10.1002/anie.201100399>

Strona internetowa wydawcy

onlinelibrary.wiley.com