

## Mechanistic Pathways in Cyanide-Mediated Benzoin Condensation: A Comprehensive Electron Localisation Function (ELF) and Catastrophe Theory Analysis of the Umpolung Reaction

### Autorzy

Michał Michalski

Sławomir Berski

### Rok wydania

2025

### Czasopismo

Molecules

### Numer woluminu

30

### Strony

378/1-378/11

### DOI

10.3390/molecules30020378

### Kolekcja

Naukowa

### Język

Angielski

### Typ publikacji

Artykuł

### Streszczenie

This research investigates the mechanism of the cyanide-type umpolung reaction in benzoin condensation using topological analysis of ELF and catastrophe theory. The study achieves a comprehensive understanding of the evolution of chemical bonds and non-bonding electron density in the reaction of benzaldehyde and cyanide ions. The results reveal that the reaction proceeds through five transition state structures, with the formation of Lapworth's cyanohydrin being the rate-determining step. The study characterises topological catastrophes in the evolution of the ELF field and provides a detailed description of the evolution of electron density in the mechanism of the reaction. An in-depth analysis of ELF catastrophes confirms the well-established Lapworth mechanism.

### Słowa kluczowe

umpolung reaction, benzoin condensation, BET, ELF

### Licencja otwartego dostępu

#### CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>

### Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.3390/molecules30020378>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-25 11:03:38

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/VDjbgX6>.