

研究论文

水助酮和烯醇类化合物互变异构反应机理的理论研究

郝娇娇 王长生

(辽宁师范大学化学化工学院 大连 116029)

收稿日期 2008-11-12 修回日期 2009-1-7 网络版发布日期 2009-6-28 接受日期 2009-2-24

摘要

采用MP2方法研究了水助 $\text{MeC(=O)(CH}_2\text{R)}$ 与 MeC(OH)(=CHR) 之间的异构化反应, 确定了相应的过渡态结构并计算了反应势垒. 研究表明, 常温下 $\text{MeC(=O)(CH}_2\text{R)}$ 与 MeC(OH)(=CHR) 之间的异构化反应容易通过2个水分子的参与而实现. 研究结果还表明, 发生质子转移的碳原子在过渡态中采取近 sp^3 杂化. 凡是能够稳定该 sp^3 轨道上的孤对电子的取代基, 都将使质子转移反应的势垒降低, 使异构化反应易于进行.

关键词

[互变异构](#) [质子转移](#) [水助](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

王长生 chwangcs@lnnu.edu.cn

作者个人主页:

郝娇娇 王长生

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF \(639KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[互变异构” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [王长生, 郝娇娇](#)