

NAD(P)H辅酶模型还原碳正离子反应的研究: 动力学、热力学及反应机理

鲁云, 鲜明, 程津培, 夏焱中

南开大学化学系; 山西大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文对NAD(P)H模型物BNAH同xanthylium正离子反应的动力学进行了较为详尽的测定。同位素效应, 自由基抑制剂对反应的影响以及对不同机理模式中各基元步骤的热力学趋动力的研究均表明, 反应由决速的电子转移引发, 随后通过快速的氢原子转移而形成产物。动力学活化参数的分析指出, 电子转移前反应底物间首先形成一个预配合平衡。本文还对BNAH还原9-苯基xanthylium正离子和三苯甲烷正离子的机理进行了较合理的估测。

关键词 [动力学](#) [反应机理](#) [热力学](#) [还原反应](#) [同位素效应](#) [抑制剂](#) [三苯基甲烷](#) [辅酶](#) [阳碳离子](#) [电子转移反应](#) [自由基](#)

分类号 [Q55](#) [0643](#)

Investigation on the reduction of carbocations by BNAH: Kinetics, thermodynamics, and reaction mechanisms

LU YUN, XIAN MING, CHENG JINPEI, XIA CHIZHONG

Abstract The reduction of xanthylium cation by BNAH has been thoroughly investigated. The observed kinetic isotope effect, radical inhibitor (DNB) effect, and the driving forces for each mechanistic step in various mechanisms indicate that the reaction proceeds via an initial rate-determining electron transfer and is followed by a fast hydrogen atom abstraction. The kinetic activation parameters measured in this work show that there is a preequilibrium between two reactants prior to the electron transfer. The mechanisms of the reductions of 9-phenylxanthylium and triphenylmethyl cations by BNAH are also discussed.

Key words [DYNAMICS](#) [REACTION MECHANISM](#) [THERMODYNAMICS](#) [REDUCTION REACTION](#) [ISOTOPE EFFECT](#) [INHIBITOR](#) [TRIPHENYLMETHANE](#) [COENZYME](#) [CARBONIUM](#) [ELECTRON TRANSFER REACTION](#) [FREE RADICALS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(496KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“动力学”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [鲁云](#)
- [鲜明](#)
- [程津培](#)
- [夏焱中](#)