

## 2, 3-二甲基-1-对氯苯磺酰基咪唑啉盐与邻氨基苯酚反应的量子化学研究

康从民,冯大诚,戚传松,吕文彩,赵伟安,蔡政亭

山东大学理论化学研究所,济南(250100)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 用量子化学方法对叶酸辅酶模型化合物2, 3-二甲基-1-对氯苯磺酰基咪唑啉盐与邻氨基苯酚的反应进行了理论研究。结果表明,咪唑啉环有两种开环方式,反应可以通过两种途径实现,得到较稳定的中间体或者实现一碳单元的完全转移。

通过优化计算所有步骤的中间体和过渡态的结构可知,各个中间体和过渡态具有不同的构型、构象,有些过程的构象变化是进行下一步反应所必需的,在所有过程中 质子转移步骤过渡态的能量最高,是反应的限速步骤。

**关键词** [二甲基](#) [氯苯](#) [咪唑 P](#) [氨基苯酚](#) [量子化学](#) [构型](#) [构象](#) [叶酸](#) [辅酶](#) [模型](#) [碳](#) [转移](#)  
[反应机理](#)

分类号 [0641](#)

## Quantum chemical study on one-carbon unit transfer reaction of 2,3- di-methyl-1-p-chlorobenzenesulfonylimidazolinium with 1,2-aminophenol

Kang Congmin,Feng Dacheng,Qi Chuansong,Lu Wencai,Zhao Weian,Cai Zhengting

Institute of Theoretical Chemistry, Shandong University,Jinan (250100)

### Abstract

**Key words** [DIMETHYL GROUP](#) [CHLORO BENZENE](#) [GLYOXALINE P](#) [AMINOPHENOL](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [CONFIGURATION](#) [CONFORMATION](#) [FOLIC ACID](#) [COENZYME](#) [MODELS](#) [CARBON TRANSFER](#) [REACTION MECHANISM](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

### 本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(0KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“二甲基”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [康从民](#)
- [冯大诚](#)
- [戚传松](#)
- [吕文彩](#)
- [赵伟安](#)
- [蔡政亭](#)