

研究论文

6-亚甲基环戊二烯酮与氢氰酸反应机理的理论研究

潘秀梅^{1,2}, 刘颖², 袁慧娟², 李泽生¹, 孙家锺¹, 王荣顺²

1. 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023;
2. 东北师范大学化学学院, 功能材料化学研究所, 长春 130024

收稿日期 2006-7-10 修回日期 网络版发布日期 2007-4-7 接受日期

摘要 在MP2/6-311+G**// B3LYP/6-311+G**计算水平上, 讨论了6-亚甲基环戊二烯酮和氢氰酸(HCN)的反应机理, 得到了1个络合物, 2个中间体, 13个过渡态和8个产物. 计算结果表明, 反应存在两种进攻方式, 分别是HCN进攻CO双键和CC双键, 这两种进攻方式分别包含两种反应路径. 产物之间存在同型和异型的互变异构形式, 反应过程中得到的b类酸是最稳定的产物.

关键词 [6-亚甲基环戊二烯酮](#) [氢氰酸](#) [反应机理](#) [互变异构化](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

李泽生 zeshengli@mail.jlu.edu.cn

作者个人主页: 潘秀梅^{1,2}; 刘颖²; 袁慧娟²; 李泽生¹; 孙家锺¹; 王荣顺²

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(467KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“6-亚甲基环戊二烯酮”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [潘秀梅, 刘颖, 袁慧娟, 李泽生, 孙家锺, 王荣顺](#)