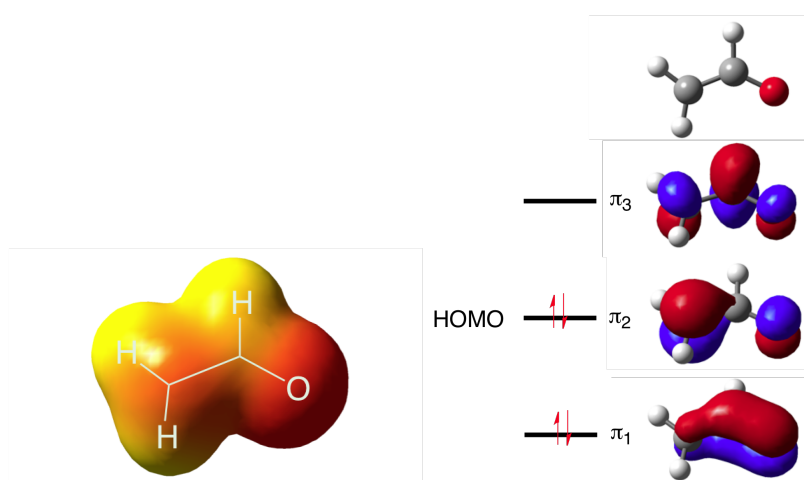


ノート 17.1 エノラートの極性と分子軌道

エノラートイオンの π 電子密度は末端炭素よりも酸素の方が高い (EPM 図参照)。実際、プロトンのように正電荷をもつ求電子種は酸素で反応する (遷移状態で軌道相互作用が比較的小さく、電荷支配の反応となる)。しかし、反応によっては求電子種が末端炭素を攻撃する。エノラートの分子軌道を見るとその理由がわかる。HOMO における電子分布が末端炭素に偏っているからであり、求電子種の LUMO との相互作用が反応を支配している場合 (軌道支配の反応) には末端炭素で反応が起こる。



エノラート $\text{H}_2\text{C}=\text{CHO}^-$ の EPM と分子軌道